THÈSE
En cotutelle entre

L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À TROIS-RIVIÈRES
En extension avec l'Université du Québec à Chicoutimi

Et

L'UNIVERSITÉ DE BRETAGNE-SUD

Pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT EN INGÉNIERIE

Par
Adrien COUTURE

AUTOMATISATION DE LA MODÉLISATION NUMÉRIQUE DES MICROSTRUCTURES DE MATÉRIAUX HÉTÉROGÈNES BASÉE SUR UNE INTÉGRATION CAO-CALCUL

FÉVRIER 2020

CETTE THÈSE A ÉTÉ ÉVALUÉE

PAR UN JURY COMPOSÉ DE :

M. Jean-Christophe CUILLIÈRE, directeur de thèse
Département de génie mécanique, Université du Québec à Trois-Rivières

M. Philippe PILVIN, directeur de thèse
UFR Sciences et Sciences de l'Ingénieur, Université de Bretagne-Sud

M. Vincent FRANÇOIS, co-directeur de thèse
Département de génie mécanique, Université du Québec à Trois-Rivières

M. Lotfi TOUBAL, président du jury
Département de génie mécanique, Université du Québec à Trois-Rivières

Mme. Hélène DUMONTET, examinatrice externe
Institut Jean Le Rond d'Alembert, Sorbonne Université

M. François GUIBAULT, examinateur externe
Département de génie informatique et génie logiciel, École Polytechnique Montréal

LA SOUTENANCE A ÉTÉ RÉALISÉE DEVANT JURY ET PUBLIC

LE 8 NOVEMBRE 2019

À L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À TROIS-RIVIÈRES à Alexandra.

Merci pour ton amour.

Remerciements

Cette thèse fut réalisée en cotutelle entre l'Université du Québec à Trois-Rivières (UQTR) dans l'Équipe de Recherche en Intégration Cao-CAlcul (ERICCA) sous la direction des professeurs Jean-Christophe Cuillière et Vincent François et l'Université de Bretagne-Sud (UBS) à l'Institut de Recherche Dupuy de Lôme (IRDL) sous la direction du professeur Philippe Pilvin.

J'exprime ma profonde gratitude aux professeurs Jean-Christophe Cuillière, Vincent François et Philippe Pilvin pour leur dévouement, leur soutien et leurs précieux conseils. Je garde de très bons souvenirs des nombreuses discussions au bureau du professeur Cuillière, des séances de débogage avec le professeur François et de l'accueil chaleureux du professeur Pilvin.

Je remercie les professeurs Lotfi Toubal de l'UQTR, Hélène Dumontet de la Sorbonne Université et François Guibault de l'École Polytechnique Montréal pour leurs participations au Jury de cette thèse. Je remercie également les professeurs Samuel Forest des Mines ParisTech et Julien Férec de l'UBS pour leur encadrement en tant que membres du Comité de Suivit Individuel.

Je tiens à remercier mes collèges de l'UQTR et de l'UBS pour leur amitié et leur aide. Les nombreuses pauses cafés, fous rires et crêpes bretonnes ont été pour moi des moments de qualité.

Enfin, je remercie mes amis, ma famille et ma conjointe pour leurs encouragements durant toutes ces années.

Résumé

La simulation numérique des matériaux hétérogènes suscite beaucoup d'intérêt de la part de la communauté scientifique puisqu'elle est une solution attrayante et économique au problème de la caractérisation du comportement thermomécanique des matériaux hétérogènes. Le comportement d'un matériau hétérogène est difficile à prédire même lorsque les propriétés des constituants sont connues et leurs forme et position bien définies. Cette difficulté est reliée aux phénomènes physiques qui se produisent à l'échelle des constituants. Ils sont issus de l'interaction des constituants et de la façon dont ils sont assemblés. La caractérisation expérimentale de ces matériaux est généralement longue, couteuse et parfois irréalisable en laboratoire. Les modèles analytiques peuvent fournir une estimation appréciable du comportement thermomécanique du matériau si le contraste entre les constituants est faible, mais prennent moins bien en compte la taille, la géométrie et la distribution des constituants. La modélisation numérique des matériaux hétérogènes permet de simuler des échantillons du matériau à étudier. Ces échantillons sont les Volumes Élémentaires Statistiques (VES) et représentent une portion de la microstructure du matériau. Pour obtenir une représentation statistique du comportement du matériau, il faut habituellement générer et simuler beaucoup de VES.

L'objectif de cette thèse est de proposer une nouvelle approche automatisée de modélisation numérique des microstructures de matériaux hétérogènes basée sur l'intégration des outils de la Conception Assistée par Ordinateur (CAO), de la génération automatique de maillages et de la simulation par la Méthode des Éléments Finis (MEF). Cette approche est proposée dans le contexte des matériaux hétérogènes à particules, mais peut s'appliquer à toutes les formes de microstructures. L'intégration de la CAO aux méthodes de génération automatique de maillages permet de générer automatiquement la discrétisation du modèle géométrique. Cette discrétisation est de bonne qualité puisqu'elle est créée à l'aide de méthodes de maillage automatique robustes et éprouvées. La génération des études par la MEF et l'analyse des résultats sont automatisées grâce aux liens qui unissent la CAO, le maillage et le solveur éléments finis. Le caractère automatique de cette approche est important compte tenu du grand nombre de réalisations nécessaires à la représentation statistique du comportement du matériau.

Le potentiel de l'approche intégrée CAO-MEF est mis en évidence par une étude comparative de l'influence de la forme des constituants et du degré des éléments de maillage sur les propriétés thermomécaniques apparentes d'un composite verre / époxy. Une méthode novatrice qui permet de générer des microstructures à fractions volumiques élevées de particules élancées est introduite. Cette nouvelle méthode est utilisée pour simuler le comportement d'un composite constitué de particules de chanvre et d'une matrice cimentaire et les résultats numériques sont confrontés aux résultats expérimentaux.

Abstract

Numerical simulation of heterogeneous materials is of great interest to the scientific community since it is an attractive and economical solution to the problem of characterizing the thermomechanical behavior of heterogeneous materials. Heterogeneous materials behavior is difficult to predict even when the constituents properties are known and their shape and position well defined. This difficulty is related to the physical phenomena that occur at the constituents scale. They originate from the constituents interaction and the way they are assembled together. The experimental characterization of these materials is time consuming, expensive and sometimes unrealizable in laboratory. Analytical models can provide an appreciable estimate of the material thermomechanical behavior if the contrast between the constituents is low, but take less account of the constituents size, geometry and distribution. Numerical modeling of heterogeneous materials can simulate samples of the material to be studied. These samples are the Statistical Volume Elements (SVE) and represent a portion of the material microstructure. To obtain a statistical representation of the thermomechanical behavior, it is usually necessary to generate many SVE. This thesis objective is to propose a new automated approach to numerical modeling of microstructures based on the integration of Computer Aided Design (CAD) methods, automatic mesh generation methods and Finite Element Analysis (FEA) method. This approach is proposed in the context of heterogeneous particulate materials, but can be applied to all types of microstructures. The integration of CAD methods with automatic mesh generation methods allows for the automatic generation of the geometric model discretization. The resulting discretization is of good quality since it is created using robust and proven automatic mesh methods. The FEA studies and their results analysis is automated thanks to the links that unite the CAD, the mesh and the finite elements solver. The automation of the approach is primal due to the large number of SVE needed for the statistical representation of the material's behavior. The potential of the CAD-FEA integrated approach is illustrated with a comparative study of the influence of the constituents shape and the mesh degree on the apparent thermomechanical properties of a glass / epoxy composite. An innovative method for generating microstructures with high volume fractions of slender particles is introduced. This new method is used to simulate the behavior of a hemp and cement composite and the numerical results are confronted with the experimental results.

Table des matières

Table des figures

Liste des tableaux

Liste des Algorithmes

Notations

Notations mathématiques

A	Scalaire
$\underline{A}$	Vecteur (A_i)
$\underline{\underline{A}}$	Tenseur d'ordre 2 (A_{ij})
$\mathbb{A}$	Tenseur d'ordre 4 (A_{ijkl})
δ_{ij}	Delta de Kronecker
μ_{ijk}	Tenseur de permutation circulaire
$\times$	Produit vectoriel $(\mu_{ijk}\underline{a}_i\underline{b}_j)$
$\otimes$	Produit tensoriel $(\underline{a}_i\underline{b}_j)$
$\cdot$	Produit tensoriel contracté une fois $(\underline{a}_i\underline{b}_i)$
$:$	Produit tensoriel contracté deux fois $(\underline{a}_{ij}\underline{b}_{ij})$
$Tr(\underline{\underline{a}})$	Trace du tenseur (a_{ii})
$\mathbf{div}(\underline{\underline{a}})$	Divergence d'un tenseur $(\underline{\underline{a}}_{ij,i})$
$==$	Opérateur de comparaison d'égalité
$\cup$	Opération booléenne d'union
$\cap$	Opération booléenne d'intersection
$\pm$	Écart-type
$\langle A \rangle_V$	Moyenne du champ A sur le volume V

Notations thermiques

T	Champ de température
$\underline{\phi}$	Vecteur flux de chaleur à l'échelle mésoscopique
$\underline{\Phi}$	Vecteur flux de chaleur à l'échelle macroscopique
$\underline{g}$	Vecteur gradient de température à l'échelle mésoscopique
$\underline{G}$	Vecteur gradient de température à l'échelle macroscopique
λ	Conductivité thermique
$\underline{\underline{\Lambda}}$	Tenseur de conductivité thermique

Notations mécaniques

$\underline{x}$	Vecteur de coordonnées
$\underline{u}$	Vecteur déplacement
$\underline{\underline{\varepsilon}}$	Tenseur de déformation à l'échelle mésoscopique
$\underline{\underline{E}}$	Tenseur de déformation à l'échelle macroscopique
$\underline{\underline{\sigma}}$	Tenseur de contrainte à l'échelle mésoscopique
$\underline{\underline{\Sigma}}$	Tenseur de contrainte à l'échelle macroscopique
$\mathbb{C}$	Tenseur des rigidités
$\mathbb{S}$	Tenseur des souplesses
K	Module de compressibilité
G	Module de cisaillement
E	Module de Young
ν	Coefficient de Poisson

Notations microstructure

$\mathcal{M}$	Matrice
$\mathcal{P}$	Particule
$\mathcal{C}$	Constituant
f_{vol}	Fraction volumique
Ω_{VES}	Domaine du VES
$\underline{p}$	Vecteur d'orientation
$\underline{\underline{a}}_2$	Tenseur d'orientation
d_e	Distance d'érosion

Notations CAO

S	Sommet
CS	Co-sommet
A	Arête
CA	Co-arête
B	Boucle
F	Face
CF	Co-face
Env	Enveloppe
V	Volume
E_{topo}	Entité topologique
$L_{E_{topo}}$	Liste d'entités topologiques
M_{struct}	Modèle géométrique d'une microstructure

Notations Maillage

$\mathcal{T}$	Maillage
K	Élément de maillage
E_n	Écart nodal global
$\mathcal{M}_t$	Carte de taille de l'écart nodal
$\mathcal{Q}_K$	Qualité d'un élément de maillage K
ϵ	Erreur de facettisation

Acronymes

VES	Volume Élémentaire Statistique
VER	Volume Élémentaire Représentatif
RSA	Random Sequential Adsorption
DCR	Dynamique des corps rigides
CAO	Conception Assistée par Ordinateur
MEF	Méthode des Éléments Finis
CSG	«Constructive Solid Geometry»
BREP	«Boundary Representation»
FFS	«Free Form Solid»
MTU	Modèle de Topologie Unifié
CL	Conditions aux Limites
CLDH	CL de Déformation Homogène
CLCH	CL de Contrainte Homogène
CLFH	CL de Flux Homogène
CLGH	CL de Gradient Homogène

Chapitre 1

Introduction

Ce document est le fruit d'une thèse réalisée en co-tutelle entre l'Université du Québec à Trois-Rivières (UQTR) et l'Université de Bretagne-Sud (UBS) avec comme sujet la modélisation par éléments finis des microstructures de matériaux hétérogènes. Ce sujet réunit les compétences en intégration des outils CAO, de maillage et de résolution par la méthode des éléments finis de l'Équipe de Recherche en Intégration Cao-CAlcul (ERICCA) de l'UQTR et l'expertise en homogénéisation numérique des matériaux hétérogènes de l'Institut de Recherche Dupuy de Lôme (IRDL) de l'UBS.

1.1 Contexte de la thèse

L'étude et la caractérisation du comportement thermomécanique d'un matériau hétérogène est une tâche complexe. Même lorsque les propriétés des constituants sont bien connues et leurs formes et positions bien définies, le comportement du matériau hétérogène peut s'avérer difficile à prédire en raison de l'interaction des constituants et de la façon dont ils sont assemblés. Une des approches pour caractériser un matériau consiste à le soumettre à plusieurs essais expérimentaux afin d'en découvrir le comportement. Cette approche expérimentale nécessite beaucoup d'opérations allant de la fabrication des échantillons du matériau jusqu'aux essais calibrés et peut parfois s'avérer impossible à réaliser compte tenu de la taille des échantillons ou de leur nature. Cette complexité limite grandement la vitesse de prototypage de nouveaux matériaux. Pour répondre à cette problématique, plusieurs modèles analytiques ont été développés afin d'estimer ou d'encadrer les propriétés thermomécaniques d'un matériau. Ces modèles peuvent donner une bonne estimation du comportement d'un matériau si le contraste entre les constituants est faible, mais prennent moins bien en compte la taille, la géométrie et la distribution des constituants.

En suivant le progrès des moyens de calcul, la modélisation numérique des matériaux hétérogènes s'est développée et fait l'objet de beaucoup d'attention dans la communauté scientifique. Comme l'approche expérimentale, la modélisation numérique d'un matériau hétérogène peut être effectuée à partir d'échantillons. Le Volume Élémentaire Statistique (VES) fait office d'échantillon numérique du matériau à étudier. Il est sollicité par des chargements afin d'en déduire une description locale des champs thermomécaniques (champ de déformation, contrainte, température, etc.). Le comportement du VES est obtenu en effectuant une homogénéisation de ces champs locaux. Le calcul des champs locaux est souvent réalisé par la méthode des éléments finis (MEF) une méthode numérique très populaire compte tenu de sa capacité à simuler une représentation numérique conforme à la microstructure du matériau hétérogène. Le calcul des champs locaux par des solveurs utilisant les transformées de Fourier rapides (FFT) suscite aussi de plus en plus d'intérêt pour sa capacité à calculer rapidement les champs pour des domaines périodiques soumis à des chargements.

Un des grands défis de la modélisation numérique des matériaux hétérogènes est de générer une représentation réaliste de la microstructure du matériau considéré. Le comportement du matériau est issu de phénomènes physiques qui se produisent à l'échelle des constituants. La représentation numérique de l'arrangement de ces constituants joue un grand rôle dans la prédiction du comportement du matériau. La simulation d'un échantillon de grande taille par rapport aux dimensions des hétérogénéités nécessite souvent beaucoup de ressources numériques. Ce problème est abordé selon deux approches : simuler un petit nombre de grands VES ou simuler un grand nombre de petits VES pour caractériser statistiquement le comportement du matériau.

La première étape de l'étude d'un VES est la génération de la représentation géométrique de la microstructure du matériau considéré. Malgré les nombreux travaux consacrés à la génération du positionnement des constituants et à la diversification des formes géométriques de ceux-ci, les capacités de modélisation demeurent limitées. Cette constatation est encore plus importante pour les matériaux hétérogènes à particules dont la répartition des constituants suit une distribution aléatoire. Ces limitations proviennent notamment de la géométrie simplifiée des constituants, de la difficulté à générer leur positionnement et de l'absence de méthodes de modélisation géométrique riches en fonctionnalité. La difficulté associée à la génération de microstructures à fraction volumique élevée en particules est une conséquence directe de ces limitations, particulièrement avec des particules non sphériques. L'étape suivante consiste à discrétiser le modèle géométrique de la microstructure. Cette étape est fortement dépendante du modèle géométrique. L'absence d'un cadre géométrique étoffé tel que celui offert par les outils de la Conception Assitée par Ordinateur (CAO) limite l'utilisation d'outils de maillage robustes et éprouvés. Il en résulte souvent une discrétisation de moyenne qualité et difficile à contrôler qui affecte les résultats de la simulation numérique. Lors de cette étape de simulation, des chargements sont appliqués sur le VES afin de le solliciter thermiquement ou mécaniquement. L'homogénéisation est effectuée à partir des résultats obtenus en réponse aux sollicitations et le comportement apparent du VES est déterminé. Plusieurs VES doivent être générés et étudiés pour obtenir une représentation statistique du comportement apparent du matériau. À cause des limitations mentionnées, l'enchaînement des différentes étapes de l'analyse d'un VES nécessite l'intervention constante de l'utilisateur ce qui rend la tâche de modélisation numérique très fastidieuse.

1.2 Objectif de la thèse

Afin d'étudier efficacement plusieurs types de matériaux hétérogènes, la méthodologie par laquelle les VES sont générés, discrétisés et simulés doit être polyvalente et automatique. L'objectif de cette thèse est de proposer une nouvelle approche automatisée de modélisation numérique des microstructures basée sur l'intégration des outils CAO, de maillage et de simulation par la MEF. Le développement de cette nouvelle approche est un défi intéressant, car il allie les domaines de la modélisation géométrique, de la génération automatique de maillage, de la MEF et de l'homogénéisation numérique des matériaux hétérogènes, des domaines de recherche souvent traités de façon distincte. Cette nouvelle approche est proposée dans le contexte plus spécifique des microstructures aléatoires à particules. Les microstructures considérées sont constituées de particules positionnées aléatoirement dans une matrice qui les enveloppe complètement de sorte qu'aucune particule n'entrent en contact.

1.3 Présentation de la thèse

Le chapitre 2 débute par une présentation des concepts fondamentaux de la modélisation par changement d'échelle des matériaux hétérogènes. Une revue de l'état de l'art de la modélisation numérique des matériaux hétérogènes aléatoires à particules est ensuite présentée. L'approche intégrée CAO-MEF est détaillée en introduisant chacun de ces composants et une discussion sur la pertinence de cette approche dans le contexte de la thèse conclut le chapitre.

La méthodologie de modélisation automatique des microstructures de matériaux hétérogènes est présentée au chapitre 3. La présentation de cette méthode suit de façon chronologique les étapes de la modélisation des VES de la génération du modèle géométrique jusqu'à l'homogénéisation. Finalement, une discussion sur le processus d'automatisation est présentée.

Au chapitre 4, une étude d'un composite constitué de particules sphériques ou cylindriques de verre baignées dans une matrice époxy est détaillée. Cette étude a pour but d'illustrer le potentiel de l'utilisation de l'approche intégrée CAO-MEF. Une discussion sur l'intérêt de cette approche est présentée à la fin du chapitre.

Le chapitre 5 introduit une méthode novatrice qui permet de générer des microstructures à fractions volumiques élevées de particules tout en minimisant les effets indésirables associés aux conditions aux limites. L'étude du composite verre / époxy du chapitre 4 est reprise afin de comparer les résultats. Une discussion sur la validité et l'utilité de cette nouvelle méthode est exposée à la fin du chapitre.

Afin de confronter la nouvelle approche de modélisation des matériaux hétérogènes avec des données expérimentales, une étude d'un composite constitué de particules de chanvre et d'une matrice de chaux hydratée est présentée au chapitre 6. Les résultats de l'analyse numérique sont confrontés aux résultats expérimentaux.

Finalement, le chapitre 7 fait un retour sur l'objectif de la thèse et offre plusieurs perspectives de développement et d'utilisation de la méthode.

Chapitre 2

Étude bibliographique

L'étude bibliographique de ce chapitre est divisée en trois sections. La première section (section 2.1) présente les rudiments de la modélisation par changement d'échelle du comportement des matériaux hétérogènes. La section suivante (section 2.2) présente différentes approches de modélisation numérique des matériaux hétérogènes selon la démarche de modélisation définie à la première section. Ces deux sections ont pour but d'illustrer l'état de l'art de la modélisation numérique des microstructures à particules et de mettre en évidence les difficultés et limitations des méthodes existantes. La dernière section (section 2.3) présente l'approche intégrée qui réunit les outils de la modélisation géométrique, de maillage et de la méthode des éléments finis. Les concepts clés de la modélisation géométrique et du maillage automatique y sont introduits. Leurs intégrations avec le solveur EF dans le modèle de topologie unifié sont décrites.

2.1 Modélisation du comportement des matériaux hétérogènes par changement d'échelle

Le développement des nouveaux matériaux et leurs utilisations dans les domaines du génie n'ont cessé d'évoluer. Un nouveau matériau était autrefois obtenu par hasard, par essais erreurs ou par ingéniosité. Suivant une approche inductive, il était caractérisé à l'aide de plusieurs mesures sur des éprouvettes soumises à diverses sollicitations. Ces données permettaient de choisir puis d'identifier une loi de comportement. Il en tenait alors au marché de déterminer si ce nouveau matériau consistait en une innovation technologique ou une excentricité. Aujourd'hui, ce cheminement tend de plus en plus à s'inverser. Motivés par des besoins industriels précis, les nouveaux matériaux sont conçus sur mesure selon une approche déductive qui repose sur la compréhension grandissante de la relation entre la structure *mésoscopique* du matériau et le comportement *macroscopique* lui conférant ses propriétés d'usage.

2.1.1 Notion de milieu homogène équivalent

Le passage du comportement mésoscopique vers le comportement macroscopique est rendu possible grâce à certaines approximations phénoménologiques. Ces approximations, basées sur la compréhension de la physique et l'expérimentation, permettent d'utiliser cette opération de changement d'échelle dans le cadre de la mécanique des milieux continus, en considérant le comportement macroscopique comme étant le résultat d'une homogénéisation du comportement mésoscopique. Le comportement homogénéisé définit le milieu macroscopique dit «Milieu Homogène Équivalent» (MHE). Déterminé à partir des propriétés intrinsèques des constituants du matériau hétérogène et de sa morphologie, le MHE est substitué au milieu hétérogène permettant ainsi l'intégration du matériau dans un calcul de structure en génie civil ou en génie mécanique.

2.1.2 Notion de volume élémentaire

Comme en laboratoire où l'on caractérise le comportement d'un matériau à partir d'échantillons de celui-ci, le comportement du MHE est établi à partir d'un Volume Élémentaire Représentatif (VER) qui peut être obtenu à partir d'une série de Volumes Élémentaires Statistiques (VES). Le VES est l'équivalent d'une éprouvette en laboratoire. Tout comme avec une éprouvette, le *comportement apparent* d'un VES à lui seul peut souvent mal représenter le comportement réel du matériau. C'est pourquoi le VER peut être défini à partir de la représentation statistique du *comportement effectif* obtenu par le cumul du comportement apparent de plusieurs VES.

2.1.3 Notion d'échelle et de dimension du VER

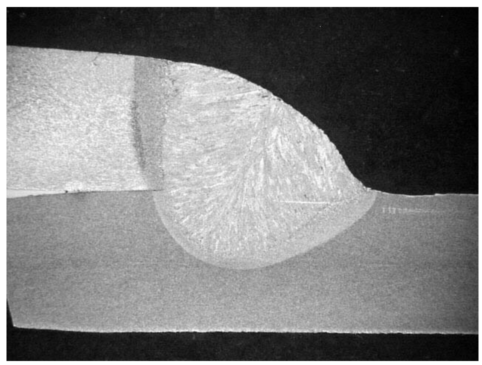
Le caractère représentatif du VER oblige à ce que la taille des VES soit suffisamment grande par rapport à la taille des hétérogénéités de la microstructure, mais suffisamment petite vis-à-vis des dimensions de la structure. Considérant l'encadrement de la taille du VER, une question se pose : quelle est la plus petite échelle pertinente ? La réponse à cette question repose sur la relation entre le type de comportement macroscopique recherché et l'importance des différents mécanismes à une échelle donnée sur ce comportement. Par exemple, les deux structures mécaniques illustrées à la figure 2.1 ont des hétérogénéités de dimensions très différentes et des mécanismes de déformation très différents. Le module de compressibilité du béton utilisé pour la formation des treize voûtes du barrage (Fig. 2.1a) est principalement influencé par le ratio des différents constituants (granulats, sable, ciment, eau). L'échelle mésoscopique pertinente sera donc celle des granulats en considérant ceux-ci comme des milieux continus homogènes. La résistance à la rupture de la soudure (Fig. 2.1b) est influencée par la répartition des différentes phases métallurgiques générées lors de la solidification du bain fondu. L'échelle mésocopique pertinente sera celle des phases, en négligeant les mouvements des dislocations observables à l'échelle *microscopique*. En déterminant l'échelle pertinente, on peut définir la *taille caractéristique* des hétérogénéités, notée d.

Il faut maintenant considérer la taille de l'ensemble des hétérogénéités l. En gardant à l'esprit l'objectif d'intégrer à l'aide de la thermomécanique des milieux continus le comportement effectif du VER dans l'analyse d'une structure de taille caractéristique L, une double inégalité sur l s'impose :

- $l << L$: la taille de l'ensemble des hétérogénéités doit être inférieure à la dimension caractéristique de la structure à étudier de sorte que le comportement effectif soit considéré comme un point matériel intégrable dans le domaine de la structure ;
- $l >> d$: le nombre des hétérogénéités doit être suffisamment grand pour que le comportement effectif soit représentatif du comportement macroscopique homogène.

Ces tailles caractéristiques conduisent à une représentation incomplète de la réalité en nécessitant l'approximation de différents phénomènes présents aux échelles inférieures à l'échelle mésoscopique. La solution obtenue sera donc une estimation réaliste dans un domaine de validité bien établi.

(a) Barrage Daniel Johnson (hauteur de 214m et longueur en crête de 1314m) et centrale Manic 5, Québec, Canada, Source : Hydro-Québec



(b) Métallographie d'une soudure

FIGURE 2.1 – Structures mécaniques de différentes dimensions

2.1.4 Démarche de modélisation par changement d'échelle

La démarche de modélisation par changement d'échelle peut se décomposer en trois étapes principales : la *représentation*, la *localisation* et *l'homogénéisation* [1]. La première étape, la représentation, consiste à décrire la microstructure à étudier. La localisation vise à estimer les champs locaux de l'échelle mésoscopique induits par un chargement macroscopique. Finalement, l'homogénéisation permet de déterminer le comportement apparent à partir des champs locaux.

2.1.4.1 Représentation du matériau hétérogène

La description géométrique et mécanique de la microstructure est la première étape de la modélisation par changement d'échelle. L'échelle mésoscopique étant déterminée, on cherche à représenter géométriquement les constituants de la microstructure et décrire leurs propriétés thermomécaniques spécifiques. Comme paramètres géométriques, on peut retrouver, par exemple, la fraction volumique des constituants, leur géométrie, leur distribution spatiale et comme propriétés, les modules d'élasticité, la conductivité thermique, etc. Dans le cas d'une microstructure non périodique constituée d'une matrice et de particules, on peut définir une distribution statistique des paramètres géométriques et mécaniques étant donné que deux éléments de matière voisins ne sont pas identiques.

2.1.4.2 Localisation

L'étape de la localisation vise à calculer les différents champs locaux à l'échelle mésoscopique. Il s'agit en quelque sorte d'un problème de calcul de structure classique à la différence près que les sollicitations sont exprimées par une relation de moyenne sur une variable locale. Cette relation de moyenne est la moyenne volumique $\langle A \rangle_V$ d'un champ $A(\underline{x})$ défini en tous points $\underline{x}$ du volume V :

$$\langle A \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V A(\underline{x}) dV \tag{2.1}$$

Les contraintes $\underline{\underline{\Sigma}}$ et les déformations $\underline{\underline{E}}$ macroscopiques sont obtenues par la moyenne volumique des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$ et des déformations $\underline{\underline{\varepsilon}}$ mésoscopiques :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V \quad \text{et} \quad \underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V \tag{2.2}$$

Le gradient de température $\underline{G}$ et le flux de chaleur $\underline{\Phi}$ macroscopiques sont obtenus par la moyenne volumique du gradient de température $\underline{g}$ et du flux de chaleur $\underline{\phi}$ mésoscopiques :

$$\underline{G} = \langle \underline{g} \rangle_V \quad \text{et} \quad \underline{\Phi} = \langle \underline{\phi} \rangle_V \tag{2.3}$$

Pour les applications mécaniques en élasticité linéaire, le tenseur de localisation, tenseur d'ordre 4 est défini, pour relier les variables mésoscopiques aux variables macroscopiques. Les tenseurs de localisation des déformations $\mathbb{A}(\underline{x})$ et contraintes $\mathbb{B}(\underline{x})$ sont exprimés comme suit :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) = \mathbb{A}(\underline{x}) : \underline{\underline{E}} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) = \mathbb{B}(\underline{x}) : \underline{\underline{\Sigma}} \tag{2.4}$$

Pour vérifier l'équation 2.2, la moyenne volumique des tenseurs de localisation $\mathbb{A}(\underline{x})$ et $\mathbb{B}(\underline{x})$ doit correspondre au tenseur d'identité $\mathbb{I}$:

$$\langle \mathbb{A} \rangle_V = \mathbb{I} \quad \text{et} \quad \langle \mathbb{B} \rangle_V = \mathbb{I} \tag{2.5}$$

Les tenseurs de localisation du gradient de température $\underline{\underline{a}}(\underline{x})$ et du flux de chaleur $\underline{\underline{b}}(\underline{x})$ sont exprimés comme suit :

$$\underline{g}(\underline{x}) = \underline{\underline{a}}(\underline{x}) \cdot \underline{G} \quad \text{et} \quad \underline{\phi}(\underline{x}) = \underline{\underline{b}}(\underline{x}) \cdot \underline{\Phi} \tag{2.6}$$

Pour vérifier les relations de l'équation 2.3, la moyenne volumique des tenseurs de localisation $\underline{\underline{a}}(\underline{x})$ et $\underline{\underline{b}}(\underline{x})$ doit correspondre au tenseur d'identité $\underline{\underline{I}}$:

$$\left\langle \underline{\underline{a}} \right\rangle_V = \underline{\underline{I}} \quad \text{et} \quad \left\langle \underline{\underline{b}} \right\rangle_V = \underline{\underline{I}} \tag{2.7}$$

Une attention particulière doit être portée sur le choix des sollicitations. Avant de définir les conditions aux limites à appliquer sur un VES, il faut se rappeler l'objectif final de cette démarche qui est de déterminer le comportement du MHE. Pour un problème mécanique, cela consiste à calculer le tenseur d'élasticité apparent $\mathbb{C}^{app}$. Ce tenseur peut être défini selon deux approches, soit l'approche *mécanique*, soit l'approche *énergétique*. L'approche mécanique relie les contraintes $\underline{\underline{\Sigma}}$ aux déformations $\underline{\underline{E}}$ macroscopiques par le tenseur d'élasticité apparent $\mathbb{C}^{app}_{meca}$:

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}^{app}_{meca} : \underline{\underline{E}} \tag{2.8}$$

L'approche énergétique relie respectivement la moyenne volumique de l'énergie de déformation mésoscopique et l'énergie de déformation macroscopique par le tenseur $\mathbb{C}^{app}_{ener}$:

$$\left\langle \frac{1}{2}\underline{\underline{\varepsilon}} : \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}} \right\rangle_V = \frac{1}{2}\underline{\underline{E}} : \mathbb{C}^{app}_{ener} : \underline{\underline{E}} \tag{2.9}$$

où $\mathbb{C}(\underline{x})$ représente le tenseur des rigidités en tous points du domaine V. Les conditions aux limites doivent assurer l'équivalence entre $\mathbb{C}^{app}_{meca}$ et $\mathbb{C}^{app}_{ener}$. Cette équivalence est vérifiée par la condition de macro-homogénéité ou condition de Hill qui établit l'égalité entre la moyenne volumique du travail microscopique et le travail macroscopique :

$$\frac{1}{2}\left\langle \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\sigma}} \right\rangle_V = \frac{1}{2}\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}} \tag{2.10}$$

Il existe plusieurs types de conditions aux limites vérifiant la condition de macro-homogénéité, par exemple les conditions aux limites *homogènes sur le contour* et les conditions aux limites *périodiques* applicables idéalement sur des microstructures périodiques. Les conditions aux limites de contrainte, de déformation, de gradient de température et de flux de chaleur homogène sur le contour sont présentées.

Conditions aux limites de contrainte homogène sur le contour (CLCH)

Le vecteur de contrainte $\underline{t}(\underline{x})$ est imposé sur le contour ∂V où $\underline{\underline{\Sigma}}^0$ est un tenseur de contrainte symétrique et $\underline{n}$ la normale unitaire sortante telle que :

$$\underline{t}(\underline{x}) = \underline{\underline{\Sigma}}^0 \cdot \underline{n} \qquad \forall \underline{x} \in \partial V \tag{2.11}$$

On démontre grâce au théorème de flux-divergence et l'équilibre statique en l'absence de forces volumiques que la moyenne volumique $\underline{\underline{\Sigma}}$ des contraintes locales $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})$ du VER est égal à l'état de contrainte $\underline{\underline{\Sigma}}^0$ imposé sur le contour du VER :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) dV = \underline{\underline{\Sigma}}^0 \tag{2.12}$$

Dans cette situation, le champ de déformations locales $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x})$ permet de calculer la déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}$:

$$\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) dV \tag{2.13}$$

Conditions aux limites de déformation homogène sur le contour (CLDH)

Le vecteur de déplacement $\underline{u}(\underline{x})$ est imposé sur le contour ∂V où $\underline{\underline{E}}^0$ est un tenseur de déformation symétrique tel que :

$$\underline{u}(\underline{x}) = \underline{\underline{E}}^0 \cdot \underline{x} \qquad \forall \underline{x} \in \partial V \tag{2.14}$$

On retrouve la relation entre la moyenne volumique $\underline{\underline{E}}$ des déformations locales $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x})$ du VER et l'état de déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}^0$ grâce au théorème de flux-divergence, à la compatibilité de $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u})$ et à la continuité du déplacement $\underline{u}(\underline{x})$:

$$\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) dV = \underline{\underline{E}}^0 \tag{2.15}$$

Dans cette situation, le champ de contraintes locales $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})$ permet de calculer la contrainte macroscopique $\underline{\underline{\Sigma}}$:

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) dV \tag{2.16}$$

Conditions aux limites de gradient de température homogène sur le contour (CLGH)

La température $T(\underline{x})$ est imposée sur le contour ∂V où $\underline{G}^0$ est un vecteur tel que :

$$T(\underline{x}) = \underline{G}^0 \cdot \underline{x} \qquad \forall \underline{x} \in \partial V \tag{2.17}$$

La relation entre la moyenne volumique $\underline{G}$ des gradients de température locaux $\underline{g}(\underline{x})$ est définie comme suit :

$$\underline{G} = \langle \underline{g} \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V \underline{g}(\underline{x}) dV = \underline{G}^0 \tag{2.18}$$

Dans cette situation, les flux de chaleur locaux $\underline{\phi}(\underline{x})$ permettent de calculer le flux de chaleur macroscopique $\underline{\Phi}$:

$$\underline{\Phi} = \langle \underline{\phi} \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V \underline{\phi}(\underline{x}) dV \tag{2.19}$$

Conditions aux limites de flux de chaleur homogène sur le contour (CLFH)

La composante normale $\underline{q}_n$ est imposé sur le contour ∂V où $\underline{\Phi}^0$ est le flux de chaleur macroscopique et $\underline{n}$ la normale unitaire sortante tel que :

$$\underline{q}_n = \underline{\Phi}^0 \cdot \underline{n} \qquad \forall \underline{x} \in \partial V \tag{2.20}$$

La relation entre la moyenne volumique $\underline{\Phi}$ des flux de chaleur locaux $\underline{\phi}(\underline{x})$ est définie comme suit :

$$\underline{\Phi} = \langle \underline{\phi} \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V \underline{\phi}(\underline{x}) dV = \underline{\Phi}^0 \tag{2.21}$$

Dans cette situation, les gradients de température locaux $\underline{g}(\underline{x})$ permettent de calculer le gradient de température macroscopique $\underline{G}$:

$$\underline{G} = \langle \underline{g} \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V \underline{g}(\underline{x}) dV \tag{2.22}$$

2.1.4.3 Homogénéisation

L'étape d'homogénéisation consiste à déterminer le comportement apparent du volume d'étude V. En mécanique, cela revient à calculer le tenseur apparent des rigidités $\mathbb{C}^{app}$ ou des souplesses $\mathbb{S}^{app}$. On retrouve le tenseur des rigidités apparent :

$$\begin{aligned}
\underline{\underline{\Sigma}} &= \left\langle \underline{\underline{\sigma}} \right\rangle_V && \text{(CLDH sur le contour)} \\
&= \left\langle \mathbb{C}(\underline{x}) : \underline{\underline{\varepsilon}} \right\rangle_V && \text{(Comportement local)} \\
&= \left\langle \mathbb{C}(\underline{x}) : \mathbb{A}(\underline{x}) : \underline{\underline{E}} \right\rangle_V && \text{(Localisation)} \\
&= \langle \mathbb{C} : \mathbb{A} \rangle_V : \underline{\underline{E}} \\
&= \mathbb{C}^{app} : \underline{\underline{E}} && \text{(Tenseur des rigidités apparent)}
\end{aligned} \tag{2.23}$$

et le tenseur des souplesses apparent :

$$
\begin{aligned}
\underline{\underline{\Sigma}} &= \left\langle \underline{\underline{\sigma}} \right\rangle_V && \text{(CLCH sur le contour)} \\
&= \left\langle \mathbb{S}(\underline{x})\colon \underline{\underline{\varepsilon}} \right\rangle_V && \text{(Comportement local)} \\
&= \left\langle \mathbb{S}(\underline{x})\colon \mathbb{B}(\underline{x})\colon \underline{\underline{E}} \right\rangle_V && \text{(Localisation)} \\
&= \langle \mathbb{S}\colon \mathbb{B} \rangle_V \colon \underline{\underline{E}} \\
&= \mathbb{S}^{app}\colon \underline{\underline{E}} && \text{(Tenseur des souplesses apparent)}
\end{aligned}
\tag{2.24}
$$

où $\mathbb{C}(\underline{x})$ et $\mathbb{S}(\underline{x})$ sont les tenseurs des rigidités et des souplesses locaux et $\mathbb{S} = \mathbb{C}^{-1}$. En conduction thermique, cela consiste à calculer le tenseur des conductivités apparentes $\underline{\underline{\Lambda}}^{app}$ reliant le flux thermique $\underline{\Phi}$ et le gradient $\underline{G}$ thermique macroscopiques :

$$
\underline{\Phi} = -\underline{\underline{\Lambda}}^{app} \cdot \underline{G} \tag{2.25}
$$

2.1.4.4 Encadrement du comportement apparent

Idéalement, comme mentionné dans la section 2.1.3, la taille de l'ensemble des hétérogénéités l qui définit la taille du VES doit être suffisamment grande pour que le comportement effectif soit représentatif du comportement macroscopique. Face à cet idéal, le comportement apparent obtenu selon les CLCH et CLDH ou CLGH et CLFH convergent vers une équivalence. En pratique, il n'est pas toujours possible d'atteindre cette taille idéale à cause du niveau de complexité associé et des limites des moyens numériques. Dans cette situation, ces paires de conditions aux limites forment l'encadrement [2] du comportement apparent tel que :

$$
\mathbb{C}^{app}_{CLCH} \leq \mathbb{C}^{app} \leq \mathbb{C}^{app}_{CLDH} \tag{2.26}
$$

et

$$
\underline{\underline{\Lambda}}^{app}_{CLGH} \leq \underline{\underline{\Lambda}}^{app} \leq \underline{\underline{\Lambda}}^{app}_{CLFH} \tag{2.27}
$$

Il a été démontré que plus la taille du VES augmente, plus l'encadrement se ressert [3]. Cependant, cette convergence peut être lente et doit être prise en compte pour choisir la taille des VES.

2.1.4.5 Élaboration des VES

L'élaboration des VES peut dépendre de plusieurs facteurs. Il n'y a pas de recette unique qui permettrait de connaître la composition idéale. La compréhension de certains concepts clés peut cependant guider ce choix.

Tout d'abord, il est primordial d'ajuster la taille du VES en fonction du comportement à modéliser. Par exemple, si le modèle recherché est la réponse harmonique d'une microstructure soumise à des sollicitations de longueur d'onde λ, il se doit que la taille de l'ensemble des hétérogénéités l soit plus grande que λ. La valeur de l'écart d'encadrement souhaité va aussi influencer le choix de la taille du VES. En effet, plus la taille augmente, plus l'encadrement se ressert. Cependant, augmenter l au prix d'approximations phénoménologiques trop importantes n'est pas non plus souhaitable. Ces approximations, nécessaires pour réduire le niveau de complexité du modèle, pourraient cacher des mécanismes de grande influence sur le comportement effectif.

Incorporer les distributions des caractéristiques géométriques et mécaniques d'une microstructure non périodique dans une seule représentation fidèle au comportement macroscopique peut s'avérer laborieux, voire même impossible. En se basant sur l'hypothèse d'ergodicité, il est possible d'alléger le problème en le divisant en plusieurs petites représentations. Ainsi, il est envisageable d'utiliser plusieurs VES de tailles plus accessibles et de combiner leur comportement apparent afin d'obtenir une représentation statistique du comportement effectif du matériau [3].

2.1.5 Encadrement des propriétés effectives

La recherche de l'estimation du comportement effectif d'une microstructure à conduit à l'élaboration d'encadrements des propriétés effectives. Les bornes de VOIGT et de REUSS et les bornes de HASHIN-SHTRIKMAN sont présentées dans ce paragraphe.

2.1.5.1 Bornes de Voigt et Reuss

Les bornes de VOIGT [4] et REUSS [5] sont qualifiées de bornes du premier ordre, c'est-à-dire, qu'elles ne prennent en compte que la proportion volumique des différents constituants. La borne de VOIGT suppose que les déformations ou le gradient de température sont les mêmes dans tous les constituants de la microstructure. Le tenseur des rigidités effectif est obtenu par la moyenne arithmétique des tenseurs de rigidités locaux :

$$\mathbb{C}^{\text{VOIGT}} = \sum_{i=1}^{n} c_i \mathbb{C}_i = \langle \mathbb{C} \rangle_V \tag{2.28}$$

et de la même façon, le tenseur des conductivités thermiques effectives comme étant :

$$\underline{\lambda}^{\text{VOIGT}} = \sum_{i=1}^{n} c_i \underline{\lambda}_i = \langle \underline{\lambda} \rangle_V \tag{2.29}$$

où c_i représente la fraction volumique du constituant i. La borne de Reuss, quant à elle, considère que les constituants subissent les mêmes contraintes ou flux thermiques. Le tenseur des souplesses est défini comme suit :

$$\mathbb{S}^{\text{Reuss}} = \sum_{i=1}^{n} c_i \mathbb{S}_i = \langle \mathbb{S} \rangle_V \tag{2.30}$$

$$\mathbb{S}^{\text{Reuss}} = \sum_{i=1}^{n} c_i \mathbb{C}_i^{-1} = \left\langle \mathbb{C}^{-1} \right\rangle_V \quad \text{et} \quad \mathbb{C}^{\text{Reuss}} = \left\langle \mathbb{C}^{-1} \right\rangle_V^{-1} \tag{2.31}$$

Le tenseur des conductivités thermiques prend la forme suivante :

$$\underline{\underline{\lambda}}^{\text{Reuss}} = \left(\sum_{i=1}^{n} c_i \underline{\underline{\lambda}}_i^{-1} \right)^{-1} = \left\langle \underline{\underline{\lambda}}^{-1} \right\rangle_V^{-1} \tag{2.32}$$

La borne supérieure de Voigt et la borne inférieure de Reuss encadrent le tenseur des rigidités effectif :

$$\mathbb{C}^{\text{Reuss}} \leq \mathbb{C}^{\text{eff}} \leq \mathbb{C}^{\text{Voigt}} \tag{2.33}$$

et le tenseur de conductivité thermique :

$$\underline{\underline{\lambda}}^{\text{Reuss}} \leq \underline{\underline{\lambda}}^{\text{eff}} \leq \underline{\underline{\lambda}}^{\text{Voigt}} \tag{2.34}$$

Ces bornes sont utiles pour vérifier si un modèle est valide, mais leur encadrement est large si le contraste entre les propriétés des constituants est important. Dans la communauté du génie thermique, les bornes de Voigt et de Reuss sont souvent qualifiées de bornes de Weiner [6].

2.1.5.2 Bornes de Hashin-Shtrikman

Les bornes d'Hashin et Shtrikman [7] sont qualifiées de bornes du deuxième ordre. Contrairement aux bornes de Voigt et de Reuss qui considèrent seulement la proportion des constituants, ces bornes prennent aussi en compte la distribution spatiale des constituants. La solution du problème de l'inclusion d'Eshelby [8] est utilisée en supposant les inclusions entourées d'un matériau homogène. La borne de rigidité sera supérieure $\mathbb{C}^{HS+}$ si le matériau homogène utilisé est le matériau le plus rigide $\mathbb{C}_{max}$ et sera inférieure $\mathbb{C}^{HS-}$ si le matériau homogène est le plus souple $\mathbb{C}_{min}$:

$$\mathbb{C}^{HS+} = \left\langle \mathbb{C} : \mathbb{A}^{+} \right\rangle_V : \left\langle \mathbb{A}^{+} \right\rangle_V^{-1} \tag{2.35}$$

$$\mathbb{C}^{HS-} = \left\langle \mathbb{C} : \mathbb{A}^{-} \right\rangle_V : \left\langle \mathbb{A}^{-} \right\rangle_V^{-1} \tag{2.36}$$

où

$$\mathbb{A}^{+} = \left(\mathbb{C} + \mathbb{C}^{*}_{max}\right)^{-1} : \left(\mathbb{C}_{max} + \mathbb{C}^{*}_{max}\right) \tag{2.37}$$

$$\mathbb{A}^{-} = \left(\mathbb{C} + \mathbb{C}^{*}_{min}\right)^{-1} : \left(\mathbb{C}_{min} + \mathbb{C}^{*}_{min}\right) \tag{2.38}$$

et

$$\mathbb{C}^{*}_{max} = \mathbb{C}_{max} : \left(\left(\mathbb{S}^{E}_{max}\right)^{-1} - \mathbb{I}\right) \tag{2.39}$$

$$\mathbb{C}^{*}_{min} = \mathbb{C}_{min} : \left(\left(\mathbb{S}^{E}_{min}\right)^{-1} - \mathbb{I}\right) \tag{2.40}$$

avec $\mathbb{S}^{E}$ le tenseur d'Eshelby qui se calcule facilement pour les milieux continus globalement isotropes. Ces bornes fournissent un encadrement du tenseur des rigidités effectif plus réduit que les bornes de Voigt et de Reuss :

$$\mathbb{C}^{\text{Reuss}} \leq \mathbb{C}^{HS-} \leq \mathbb{C}^{\text{eff}} \leq \mathbb{C}^{HS+} \leq \mathbb{C}^{\text{Voigt}} \tag{2.41}$$

Ces encadrements sont utiles pour analyser les résultats obtenus par homogénéisation numérique qui sont présentés dans les chapitres 4, 5 et 6.

2.2 Modélisation numérique des microstructures

La méthodologie de modélisation par changement d'échelle du comportement d'une microstructure (section 2.1) permet d'établir la relation entre les champs locaux à l'échelle mésoscopique et les champs moyens de l'échelle macroscopique. La mise en application de cette méthodologie peut dans certains cas être analytique (section 2.1.5) ou par une approche numérique. Depuis les trente dernières années, le développement de nouvelles méthodes numériques et l'augmentation de la vitesse et de la capacité de calcul des ordinateurs ont permis la réalisation de simulations numériques de plus en plus complexes. La section 2.2.1 présente un bilan sommaire des différentes approches de modélisation numérique de microstructures hétérogènes à particules. Ce bilan est décomposé en trois groupes de méthodes, en suivant l'ordre de la méthodologie de modélisation par changement d'échelle, soit les étapes de génération, de représentation et de résolution des VES.

2.2.1 Génération des microstructures

La première étape de la description numérique d'une microstructure consiste à générer la morphologie du matériau. Pour les matériaux hétérogènes constitués d'une matrice et de particules, on peut classer en deux catégories les différentes méthodes répertoriées dans la littérature : les méthodes *séquentielles* et les méthodes *concurrentes*. Le principe de fonctionnement des méthodes de génération séquentielle est de remplir, une particule à la fois, un système initialement vide ou peuplé d'un arrangement fixe de particules. L'opération d'ajout peut être basée sur une procédure déterministe et/ou stochastique. La méthode séquentielle la plus répandue est la méthode d'addition séquentielle aléatoire, plus connue sous la formulation anglophone *«Random Sequential Adsorption»* (RSA).

La quantité de particules comprise dans un VES est généralement exprimée en fraction volumique (f_{vol}) qui se calcule selon le rapport entre le volume total des particules dans le VES sur le volume du VES :

$$f_{vol} = \frac{\sum V_{\mathcal{P}}}{V_{VES}} \tag{2.42}$$

2.2.1.1 Addition séquentielle aléatoire (RSA)

La méthode RSA est une méthode d'ajout séquentiel de type stochastique (Fig. 2.2). De façon générale, la procédure d'ajout d'une nouvelle particule à l'intérieur d'un

VES s'effectue comme suit. La première étape consiste à générer une nouvelle particule. Un tirage aléatoire, basé sur une distribution prédéterminée, génère les coordonnées de la position d'une nouvelle particule. Les paramètres géométriques de la particule sont obtenus, soit de façon déterministe, soit de façon aléatoire. Par exemple, le rayon des particules sphériques ou cylindriques peut suivre une distribution de taille déterminée expérimentalement ou être constant. L'orientation des particules peut aussi être fixe ou aléatoire. La seconde étape de la méthode consiste à déterminer si la nouvelle particule intersecte une ou plusieurs particules déjà présentes et si, dans certains cas, elle respecte une *distance minimale* ($Dist_{min}$) avec les particules voisines. Lorsqu'il y a intersection ou que $Dist_{min}$ n'est pas respectée, la particule est rejetée et une nouvelle particule est générée. Autrement, la particule est insérée. L'ajout de particules prend fin lorsque la *fraction volumique* ($f_{vol_{cible}}$) cible est atteinte [9, 10].

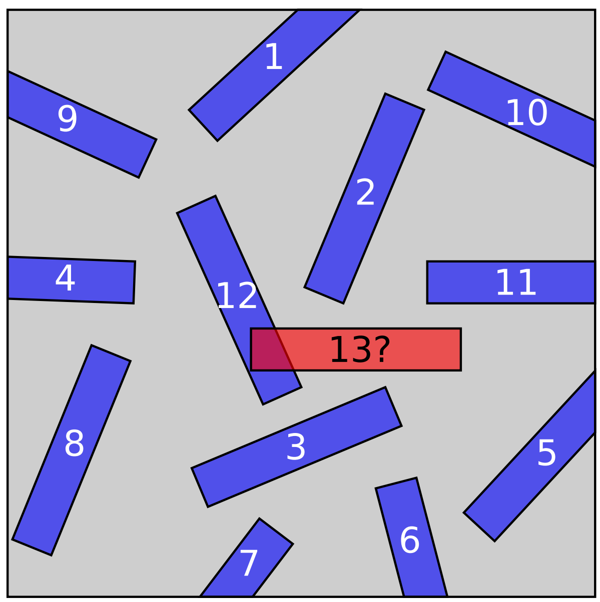


FIGURE 2.2 – Illustration de la méthode RSA. La particule en rouge (13) est nouvellement créée et un test d'intersection avec les particules avoisinantes doit être effectué.

Problématique de détection d'intersections entre particules et du respect de la distance minimale

Une des problématiques de cette méthode est la détection des intersections entre particules. Cette étape de détection est réalisée à chaque nouveau tirage et doit par conséquent être rapide et précise. Suivant les nombreux travaux basés sur le problème de l'inclusion d'ESHELBY [8] et considérant la difficulté de détection d'intersections, il n'est pas surprenant de constater que, dans plusieurs travaux de recherche, la particule soit représentée par une sphère. L'utilisation de la sphère simplifie grandement la détection des intersections. En effet, il suffit simplement de connaître les centres et les rayons des deux particules pour savoir si elles se chevauchent [11–19]. Il en va de même pour le respect de la distance minimale entre particules. Pour utiliser des formes de particules plus complexes, il faut avoir recourt à des algorithmes de calcul plus avancés. L'algorithme proposé par Lin et al. [20] permet de calculer itérativement la distance entre deux ellipsoïdes et fut utilisé [16, 21, 22] comme méthode de détection d'intersections. L'intersection de deux cylindres peut être réalisée en calculant la distance minimale entre les deux axes et en vérifiant que cette distance est supérieure à $2r + d$ où r est le rayon du cylindre et d la distance minimale à observer [23–25]. Finalement, l'intersection entre deux particules de forme polyédrique est déterminée en vérifiant si un point d'une particule existante se trouve d'un côté d'un des plans de la nouvelle particule tandis que les autres points se trouvent de l'autre côté du plan [26].

Génération de microstructures à fraction volumique élevée

La seconde problématique de la méthode RSA est l'obtention de fractions volumiques élevées. Puisque les particules insérées dans le VES sont fixes, l'insertion de nouvelles particules augmente considérablement la probabilité d'intersections. Cette problématique complique la génération de microstructures obtenues par un procédé qui permet aux particules de bouger et de se compacter. Pour des particules sphériques de même taille, la fraction volumique maximale atteignable de $\pi/(3\sqrt{2}) \approx 74.1\%$ est obtenue avec une configuration de type cubique à faces centrées ou une configuration hexagonale compacte [27]. Cette fraction volumique est cependant loin des fractions volumiques observées avec la méthode RSA qui ne dépassent pas 40% (38.5% [28], 38.2% [29]). Afin de dépasser cette limite, une procédure de compactage peut être employée pour entasser les particules en les déplaçant aléatoirement afin d'en ajouter davantage [14] et obtenir des fractions volumiques avoisinant 50% si les particules ne sont pas en contact et 60% si elles le sont.

2.2.1.2 Méthodes concurrentes

Les méthodes concurrentes autorisent habituellement le déplacement des particules dans le volume d'étude (Fig. 2.3). Cette possibilité permet aux particules de naturellement se positionner par rapport à leurs voisines en leur appliquant un modèle de réponse aux collisions. La problématique de détection des collisions mentionnée plus haut (section 2.2.1.1) est d'une grande importance pour les méthodes concurrentes, d'autant plus que les particules sont en mouvement. Puisque la dynamique des particules (accélération et vitesse) est fonction du temps, la simulation doit être en mesure de déterminer à quel instant deux particules entrent en collision. Pour répondre à cet impératif, la gestion du temps peut suivre deux approches, soit l'approche dite *«event-driven»* ou *déterminée par les événements*, soit l'approche dite *«time-driven»* ou *déterminée par incrément de temps*.

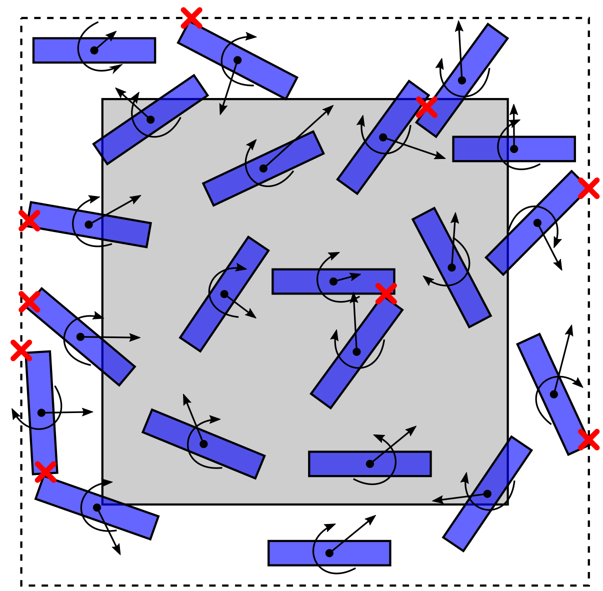


Figure 2.3 – Illustration de la méthode concurrente. Chaque particule possède une accélération et une vitesse. Les collisions sont automatiquement détectées et affectent la dynamique des particules.

Approche par événements (*event-driven*)

L'approche par événements consiste à détecter les collisions de façon analytique en tenant compte des paramètres de la dynamique des particules [30]. Cette approche est utilisée principalement avec des particules de formes sphériques compte tenu de leur géométrie simple qui permet de facilement déterminer les collisions (Fig. 2.4). Ainsi, à partir des équations de la dynamique des particules, il est possible de déterminer à quel instant surviendra la prochaine collision. Les positions, vitesses et accélérations des particules sont actualisées pour cette valeur de temps et la collision entre les deux particules est simulée. L'instant de la prochaine collision est déterminé et la simulation se poursuit. Lubachevsky et al. [31] ont proposé une méthode de croissance qui se base sur cette approche de gestion du temps. Tout d'abord, un tirage aléatoire positionne un certain nombre de centres de particules sphériques dans un volume fermé et périodique. Les sphères ont initialement un diamètre nul et un vecteur de vitesse déterminé aléatoirement est appliqué. Au fil du temps, les sphères grossissent et entrent en collision les unes avec les autres de façon élastique en préservant leur énergie cinétique. La simulation se termine lorsque la fraction volumique cible est atteinte. Avec cette méthode, il est possible d'atteindre des fractions volumiques allant jusqu'à 65% (Fig. 2.5).

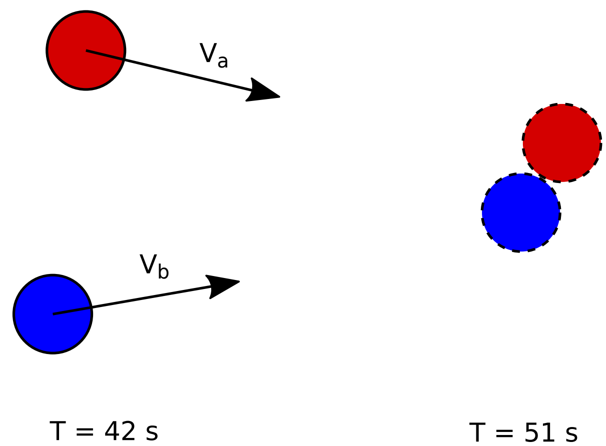


Figure 2.4 – Illustration de l'approche par événements. L'instant de la collision est déterminé à partir des équations de la dynamique des particules.

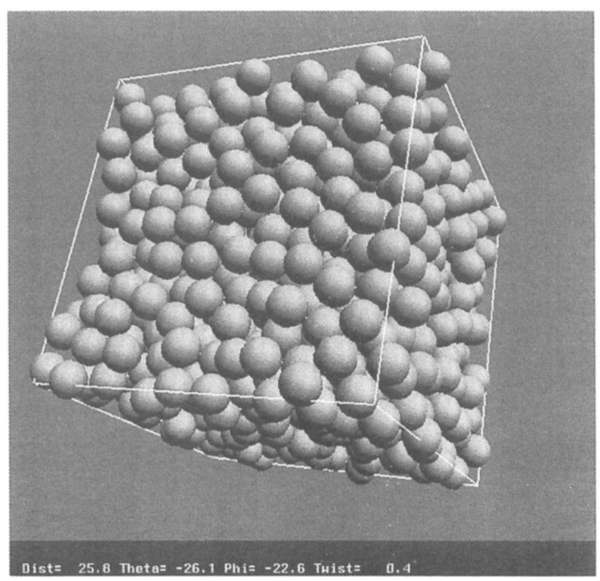


Figure 2.5 – Empilement de sphères de même taille à une fraction volumique $f_{vol} = 63.71\%$ [31].

La géométrie sphérique demeure cependant contraignante pour la génération de microstructures à particules non sphériques. Pour remédier à la situation, Donev et al. [32, 33] ont utilisé la géométrie simple de la sphère comme espace de détection de collisions et ont recouvert des particules allongées comme des ellipsoïdes d'une multitude de sphères. Les sphères, qui sont fixées à la particule, permettent la détection de collisions avec une autre particule recouverte, permettant ainsi de simuler simplement des particules non sphériques en collision (Fig. 2.6). L'algorithme de Donev et al. est très robuste, car la progression de la simulation est pilotée en fonction des collisions.

L'algorithme détecte de façon analytique les collisions à venir, les classe dans une liste en ordre de priorité et les traite une à la suite de l'autre. Cet algorithme fut utilisé pour générer la répartition de particules de chanvre dans une matrice de chaux [34] et pour générer la microstructure d'un combustible nucléaire à particules [17].

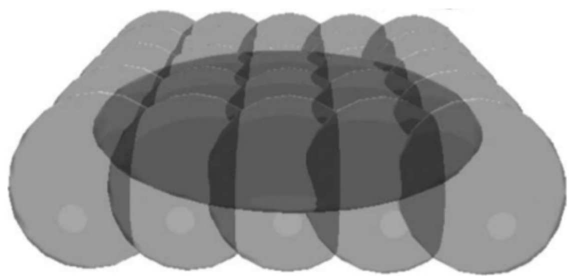


FIGURE 2.6 – Groupe de sphères enveloppant un ellipsoïde [33].

Approche par incrément de temps (*time-driven*)

Contrairement à l'approche *event-driven*, l'approche *time-driven* (Fig. 2.7) fait progresser la simulation par des petits pas de temps et réactualise la détection de collisions à chaque pas [35,36]. Ce type d'approche est moins robuste que la précédente, car il est possible, si le pas de temps est trop grand, qu'une collision ne soit pas détectée. L'ajustement du pas de temps est donc crucial. Cette méthode possède cependant l'avantage de modéliser des solides de formes convexes diverses (Fig. 2.8). Cette approche utilise la triangulation de la surface du solide et une boîte englobante pour la détection des collisions. Cette approche est habituellement utilisée dans la simulation de la dynamique des corps rigides en collision [37,38].

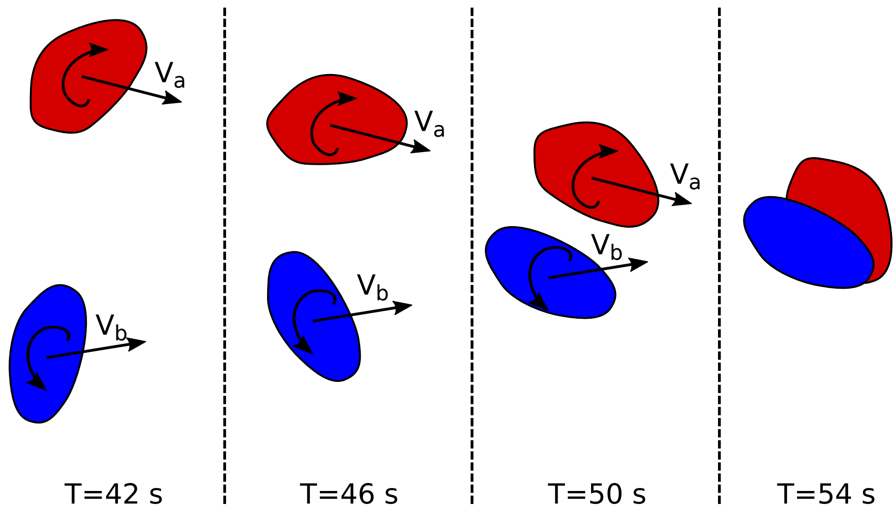


FIGURE 2.7 – Illustration de l'approche par pas de temps. Ici, la forme des particules est quelconque. L'intervalle de temps est discrétisé par pas de temps et la détection de collisions est effectuée.

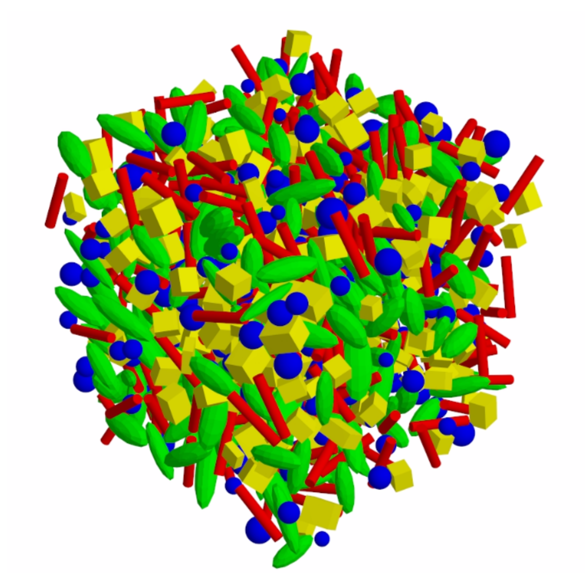


FIGURE 2.8 – Groupe de particules (sphères, cubes, ellipsoïdes, cylindres) obtenu par l'approche *«time-driven»* [39].

2.2.2 Représentation des microstructures

Les méthodes de génération présentées au paragraphe 2.2.1 sont, pour la plupart, des méthodes conçues ou adaptées spécifiquement pour une ou plusieurs formes de particules. Cette spécificité est occasionnée par la complexité de la détection des intersections entre particules qui rend difficile la généralisation des méthodes de générations. Devant cette diversité de formes de particules, se posent alors deux questions importantes : quelle est l'influence de la forme des constituants sur les propriétés macroscopiques du matériau et quelle taille de VES devrait être adoptée pour ces formes de particules ? La partie qui suit fait état de différents travaux en lien avec ces questions.

2.2.2.1 Influence de la forme de particules et de la taille du VES

L'utilisation de la sphère comme forme géométrique de la particule facilite grandement la représentation de la microstructure. En plus des avantages lors de la génération de la microstructure (section 2.2.1.1), la sphère permet d'avoir la représentation géométrique la plus simple d'une microstructure aléatoire puisque seulement deux paramètres sont nécessaires pour représenter cette forme : le centre et le rayon de la sphère. Gusev et al. [11] et Michel et al. [12] ont étudié l'effet de la taille des VES sur la disparité des valeurs du tenseur de rigidité d'une microstructure périodique à des fractions volumiques de sphères identiques (monodisperse) d'environ 25%. Il fut démontré qu'un nombre suffisant de VES ne contenant que quelques douzaines de sphères pouvais fournir une distribution peu étalée du module d'élasticité. Segurado et al. [14] et Kari et al [15] ont observé une relation similaire pour des fractions volumiques allant respectivement jusqu'à 50% et 60%. Böhm et al. [13] ont mis en évidence l'influence du ratio de forme sur les propriétés macroscopiques de trois groupes de VES composés respectivement de sphères, ellipsoïdes et cylindres à une fraction volumique de 15% pour des petits VES. Une légère augmentation du module d'élasticité par rapport aux particules sphériques fut observée pour les VES à particules ellipsoïdales et cylindriques. Pan et al. [40] ont observé une augmentation de la concentration de contraintes entre des fibres cylindriques lorsque la distance entre celles-ci diminuait. Une comparaison des propriétés élastiques apparentes de VES composées respectivement de particules sphériques, sphéroïdes oblates et sphéroïdes prolates à une fraction volumique de 13% à été réalisée par Moumen et al. [41]. Cette étude illustre l'importance de la taille du VES sur les propriétés macroscopiques. En effet, il est démontré que lorsque la taille du VES est petite, la géométrie de ses particules affecte significativement les propriétés élastiques macroscopiques, mais que lorsque la taille du VES augmente, l'influence de la géométrie diminue.

2.2.3 Calculs en champs complets

La démarche de modélisation numérique des microstructures de matériaux hétérogènes comprend une phase de résolution d'un problème de conduction thermique ou d'élasticité qui consiste à calculer les champs locaux : les contraintes et déformations en mécanique, le flux de chaleur et champ de température en thermique. Deux méthodes de résolution seront présentées ci-dessous : i) la résolution par la méthode des transformées rapides de Fourier, et ii) la résolution par la méthode des éléments finis. Cette dernière sera employée pour la suite des travaux.

2.2.3.1 Résolution par la méthode des transformées rapides de Fourier

La *méthode de résolution par transformées rapides de Fourier* (FFT) consiste à déterminer les champs locaux $\underline{u}$, $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{\sigma}}$ d'un VES discrétisé en voxels réguliers soumis à des conditions aux limites périodiques et résulvant le problème d'élasticité dans l'espace de Fourier [42–44]. En élasticité linéaire, le problème est posé comme suit :

$$\begin{aligned} \mathbf{div}(\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})) &= 0 \\ \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) &= \mathbb{C}(\underline{x}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) \\ \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) &= (\nabla \underline{u})^{sym}(\underline{x}) \\ \underline{u}(\underline{x}) &= \underline{\underline{E}}^0 \cdot \underline{x} + \underline{u}^*(\underline{x}) \end{aligned} \tag{2.43}$$

où $\underline{u}^*$ est périodique sur les faces opposées et $\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n}$ est anti-périodique sur les faces opposées. Ce problème est reformulé à l'aide du champ de polarisation lié à un milieu homogène, dit de comparaison de raideur $\mathbb{C}^0$.

Le problème transformé s'écrit comme suit :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = -\Gamma_0 * ((\mathbb{C} - \mathbb{C}^0) : \underline{\underline{\varepsilon}}) + \underline{\underline{E}}^0 \tag{2.44}$$

où Γ_0 est l'opérateur de Green. Si $\mathbb{C}^0$ est isotrope, cet opérateur est analytique et permet un traitement numérique très efficace sur une machine parallèle.

La méthode de résolution par FFT a l'avantage d'être très rapide. Les conditions aux limites doivent cependant être périodiques ce qui pose problème lors de la modélisation de microstructures non périodiques. Également, cette technique ne nécessite pas de maillage puisque le domaine d'étude est voxélisé sur une grille régulière.

2.2.3.2 Résolution par la méthode des éléments finis

La *méthode des éléments finis* (MEF) est la méthode numérique la plus couramment utilisée pour résoudre les équations aux dérivées partielles qui décrivent le comportement d'un système physique (thermique, mécanique, électromagnétisme, acoustique, météorologique, etc.) [45, 46]. Pour une étude mécanique en statique, cela revient à utiliser le théorème des travaux virtuels :

$$\forall \underline{\delta u} \quad W = -\int_V \underline{\underline{\delta \varepsilon}} : \underline{\underline{\sigma}} dV + \int_V \underline{\delta U} \cdot \underline{F}_V dV + \oint_{S_f} \underline{\delta U} \cdot \underline{f}_S dS + \sum_{i=1} \underline{\delta U}_P^i \cdot \underline{F}_P^i = 0 \quad (2.45)$$

Où $\underline{\underline{\delta \varepsilon}}(\underline{\delta u})$ est le tenseur des déformations virtuelles associé à $\underline{\delta u}$, $\underline{\underline{\sigma}}$ le tenseur des contraintes, $\underline{\delta U}$ le vecteur des déplacements virtuels, $\underline{f}_V$ le vecteur des efforts de volume dans V, $\underline{f}_s$ le vecteur des efforts de surface sur S_f, $\underline{\delta U}_P^i$ le vecteur des déplacements virtuels où sont appliquées le vecteur des forces ponctuelles $\underline{F}_P^i$.

À partir d'une discrétisation du domaine Ω en éléments de petite taille et du choix des fonctions d'interpolation des champs inconnus, il est possible de remplacer les équations aux dérivées partielles en équations algébriques linéaires. L'ensemble des équations forme un système linéaire pour les problèmes d'élasticité linéaire dans l'hypothèse des petites perturbations :

$$\underline{\underline{K}} \cdot \underline{U} = \underline{F} \quad (2.46)$$

où $\underline{\underline{K}}$ représente la matrice de rigidité, $\underline{U}$ le vecteur des déplacements nodaux et $\underline{F}$ le vecteur des forces nodales.

Des conditions aux limites sont appliquées sur le bord de Ω soit par valeur (CL de type Dirichlet), soit par gradient (CL de type Neumann). Le système d'équations linéaires augmenté des conditions limites est résolu par une méthode numérique.

Contrairement à la démarche FFT, la MEF n'a pas besoin d'une discrétisation régulière du domaine à partir de voxels. La discrétisation peut être obtenue avec différents types d'éléments et leur taille peut varier en différents endroits du domaine. Cependant, une attention particulière doit être accordée à la qualité des éléments utilisés et à leur taille afin d'éviter d'engendrer des erreurs numériques significatives. En effet, un élément fortement aplati ou distordu conduira à des erreurs numériques lors du calcul des différents champs. De plus, un élément trop grand ne pourra représenter fidèlement les champs non uniformes.

Finalement, le degré des éléments doit être pris en compte lors de l'élaboration de la simulation. Un maillage composé, à taille égale, d'éléments linéaires (ex. : tétraèdres à 4 nœuds) comportera beaucoup moins de degrés de liberté qu'un maillage composé d'éléments quadratiques (ex. : tétraèdres à 10 nœuds).

2.3 Intégration CAO, maillage, MEF

La conception assistée par ordinateur (CAO), le maillage automatique et la simulation par la méthode des éléments finis (MEF) sont des composantes clés de ce projet. Le caractère novateur du projet provient de l'intégration de ces trois domaines distincts avec comme objectif de modéliser automatiquement les matériaux hétérogènes. Avant d'aborder le sujet de l'intégration de la CAO, du maillage et de la MEF, les concepts importants de la modélisation géométrique et du maillage automatique sont présentés aux sections 2.3.1 et 2.3.2. L'intégration CAO, maillage et EF est abordée à la section 2.3.3 avec la présentation du modèle de topologie unifié, un modèle d'intégration multiplateforme qui permet de lier les entités d'un modèle géométrique aux entités de la MEF. Finalement, une analyse de la pertinence de l'approche intégrée est présentée à la section 2.3.4 afin de mettre en évidence ses intérêts pour la modélisation numérique de matériaux hétérogènes.

2.3.1 Modélisation géométrique

Au tout début du développement des logiciels de CAO, la modélisation géométrique volumique suivait deux approches différentes qui sont la modélisation par arbre de construction «*Constructive Solid Geometry*» (CSG) et la représentation par les frontières ou «*Boundary Representation*» (BREP) [47–49].

2.3.1.1 «Constructive Solid Geometry»

Le modèle CSG (Constructive Solid Geometry) définit un solide complexe comme étant une combinaison de primitives simples. Historiquement, c'est le premier modèle géométrique à avoir été utilisé commercialement [47]. Des opérations booléennes sont utilisées afin de joindre, couper et intersecter des volumes pour graduellement représenter le solide désiré. Ces opérations booléennes sont l'union, la différence et l'intersection (Fig. 2.9).

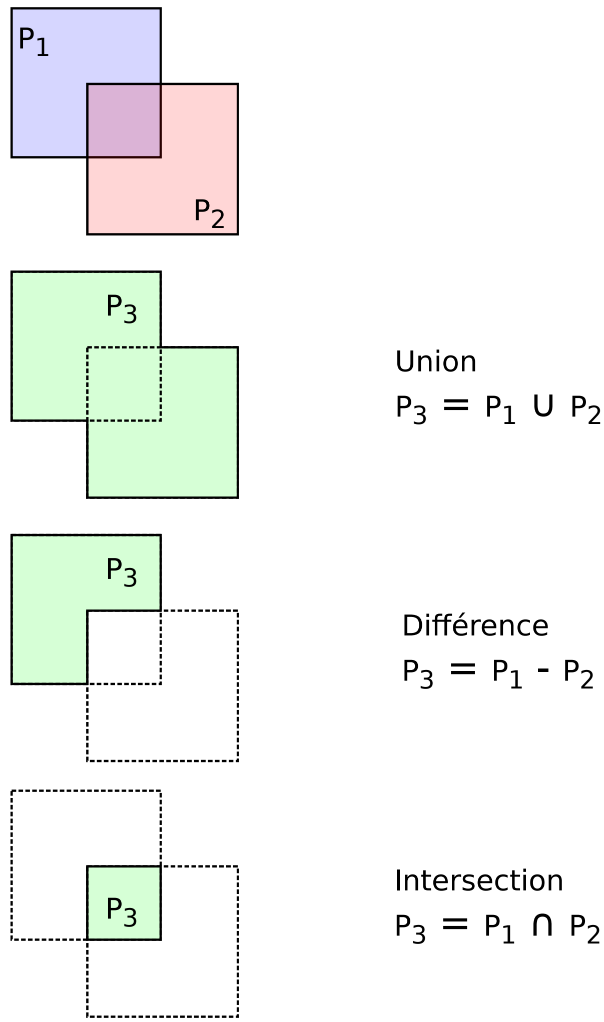


Figure 2.9 – Illustration des opérateurs booléens d'union, de différence et d'intersection.

Le modèle CSG est composé d'un arbre binaire où chaque feuille représente une forme primitive et chaque nœud représente une opération booléenne (Fig. 2.10).

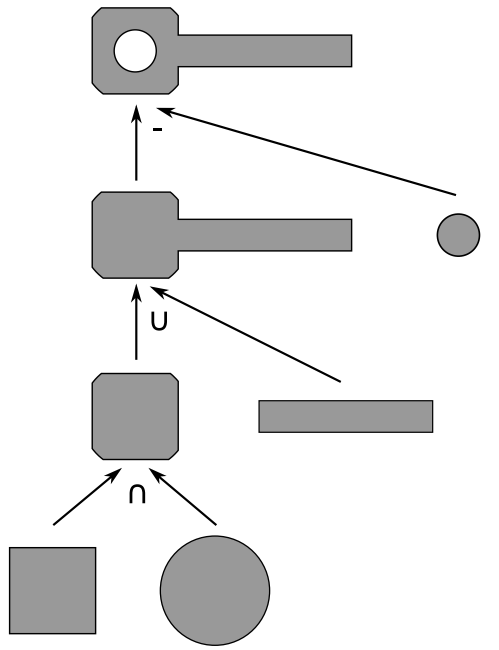
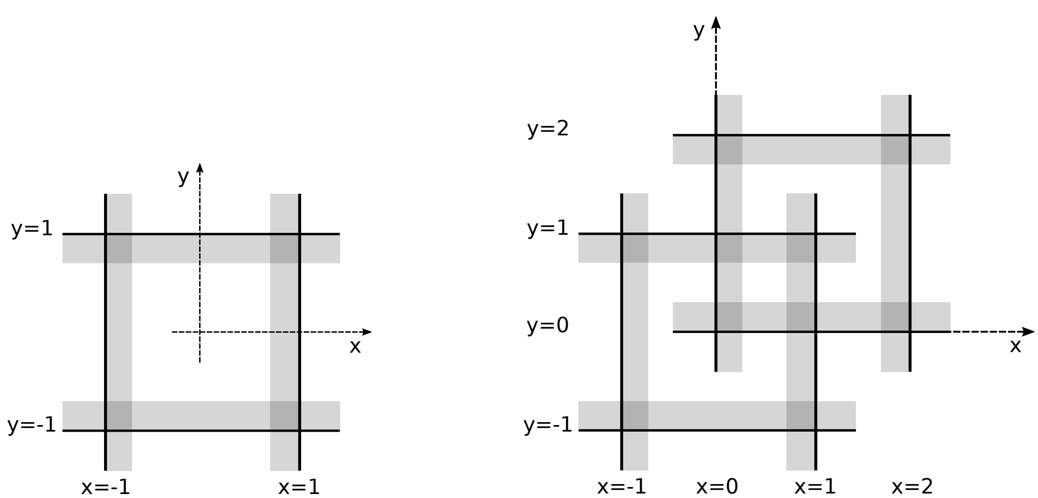


Figure 2.10 – Illustration d'un arbre CSG

Les primitives sont des formes élémentaires (cube, cylindre, sphère, etc.) ou des formes générées par balayage, extrusion ou révolution de contours. Ces formes sont définies à partir d'ensembles de demi-espaces qui définissent l'ensemble des points.



(a) Illustration d'un carré

(b) Illustration de l'union entre deux carrés

Figure 2.11 – Exemples de définition par demi-espaces.

Par exemple, un carré dessiné dans le plan xy et centré à l'origine (Fig. 2.11a) est défini comme suit :

$$(x \geq -1) \cap (x \leq 1) \cap (y \geq -1) \cap (y \leq 1) \tag{2.47}$$

L'union de deux carrés (Fig. 2.11b) sera définie comme suit :

$$((x \geq -1) \cap (x \leq 1) \cap (y \geq -1) \cap (y \leq 1)) \cup ((x \geq 0) \cap (x \leq 2) \cap (y \geq 0) \cap (y \leq 2)) \tag{2.48}$$

Ce qui fait la force du modèle CSG est sa simplicité. L'utilisation des opérateurs booléens et des transformations permet à l'utilisateur de créer beaucoup d'objets tridimensionnels. L'une des limitations du modèle CSG est qu'il n'est pas possible d'accéder directement aux faces, arêtes et sommets, car l'objet modélisé est représenté comme un ensemble continu de points et que cet ensemble est obtenu à partir d'opérations sur des sous-ensembles de points.

2.3.1.2 Modèle BREP

Le modèle BREP (*«Boundary REPresentation»*) forme une représentation complète d'un volume grâce à une collection organisée de faces, d'arêtes et de sommets. Un volume est représenté par une enveloppe fermée qui est constituée d'une ou plusieurs faces. Une face est définie par une surface et délimitée par une ou plusieurs boucles fermées composées d'arêtes. Une arête est définie par une courbe et délimitée par deux sommets. La distinction entre l'intérieur et l'extérieur d'un volume est établie à partir de la notion d'orientation des faces. Cette orientation est définie par rapport au vecteur normal de la face. À chaque face est associée une orientation qui pointe vers l'extérieur du volume (Fig. 2.12).

Les informations du BREP sont décrites sous la forme d'un graphe hiérarchique qui liste les faces, arêtes et sommets du volume. Puisque les faces reposent sur des surfaces, que les arêtes reposent sur des courbes et que les sommets reposent sur des points, le modèle BREP doit contenir deux types d'informations, soit les entités géométriques et les entités topologiques. Les courbes et surfaces paramétriques sont utilisées comme entités géométriques du BREP. Ces entités donnent ainsi à l'utilisateur un grand contrôle sur les formes à modéliser. Cette description mathématique de la frontière permet de modéliser des volumes aux faces complexes. Il n'est pas toujours possible de modéliser ces volumes à partir de formes primitives du modèle CSG.

Le modèle BREP doit cependant répondre à plusieurs critères afin d'être valide. La représentation BREP d'un volume doit être fermée puisque l'union de toutes les faces définit la frontière du volume. Contrairement au modèle CSG (Section 2.3.1.1) qui est représenté comme un ensemble continu de points, le modèle BREP sépare l'espace $\mathcal{R}^3$

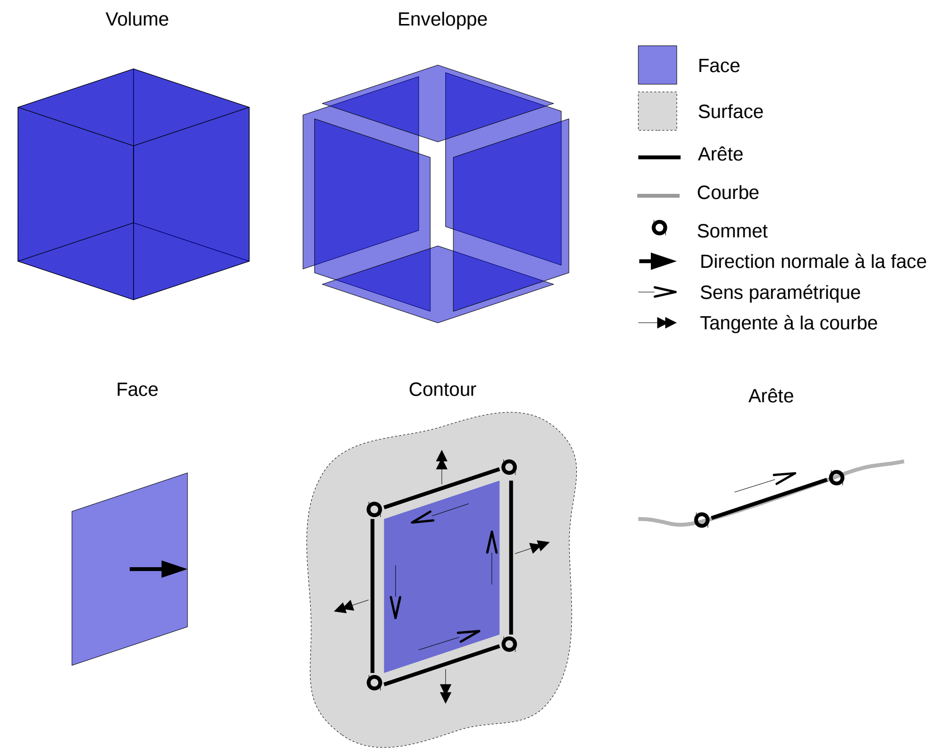


FIGURE 2.12 – Illustration du modèle BREP.

en deux ensembles de points soit l'intérieur, soit l'extérieur du volume. La frontière doit être orientable de façon à reconnaître l'intérieur de l'extérieur du volume. Finalement, une face doit avoir une surface finie et dimensionnellement homogène (ex : une face ne doit pas évoluer en arête).

Le BREP peut être produit par couture de faces ou par l'évaluation du modèle CSG. L'opération de construction du BREP à partir d'une collection de faces se nomme le *«Free Form Solid»* (FFS). Cette opération consiste à coudre les faces entre elles afin d'obtenir l'enveloppe fermée du volume. Cette méthode qui repose sur la formule d'Euler-Poincaré permet d'assurer la validité de la topologie d'un objet. Un objet qui satisfait la formule d'Euler est appelé un objet d'Euler. La formule d'Euler-Poincaré est définie comme suit :

$$N_S - N_A + N_F - 2(1 - N_G) = 0 \tag{2.49}$$

où N_S représente le nombre de sommets, N_A le nombre d'arêtes, N_F le nombre de faces et N_G le genre d'une surface. La formule d'Euler est adaptée afin de prendre en compte les passages dans le solide et les solides disjoints avec :

$$N_S - N_A + N_F - N_H + 2N_P - 2N_B = 0 \tag{2.50}$$

où N_H représente le nombre de trous dans les faces, N_P le nombre de passages et N_B le nombre de solides disjoints.

2.3.1.3 État actuel de la CAO

La CAO comprend un ensemble de techniques de modélisation géométrique et de simulation numérique destinées à la conception, à la vérification et à l'optimisation de produits. Pour un utilisateur typique, les outils de la CAO sont présentés sous une interface graphique soignée et ergonomique qui permet de créer une pièce ou un assemblage selon des contraintes de fonctionnalité, d'assemblage ou de fabrication. Les informations relatives aux opérations de conception sont structurées et hiérarchisées dans un arbre de construction «*feature manager*» (Fig. 2.13). L'arbre de construction d'une pièce comprend, la séquence des fonctions caractéristiques «*feature*» (extrusion, coupe, chanfrein, balayage, etc.) les propriétés du matériau utilisé, les finis de surface, des annotations et bien plus encore. Le modèle BREP sous-jacent est automatiquement généré et modifié à chaque étape de la conception. La conversion de l'arbre de construction en un modèle BREP est réalisée à l'aide de méthodes d'évaluation des frontières qui permettent de retrouver automatiquement les entités géométriques et topologiques. Pour un assemblage, l'arbre répertorie les différentes pièces et leurs connexions (appui-plan, glissière, pivot, rotule, etc.).

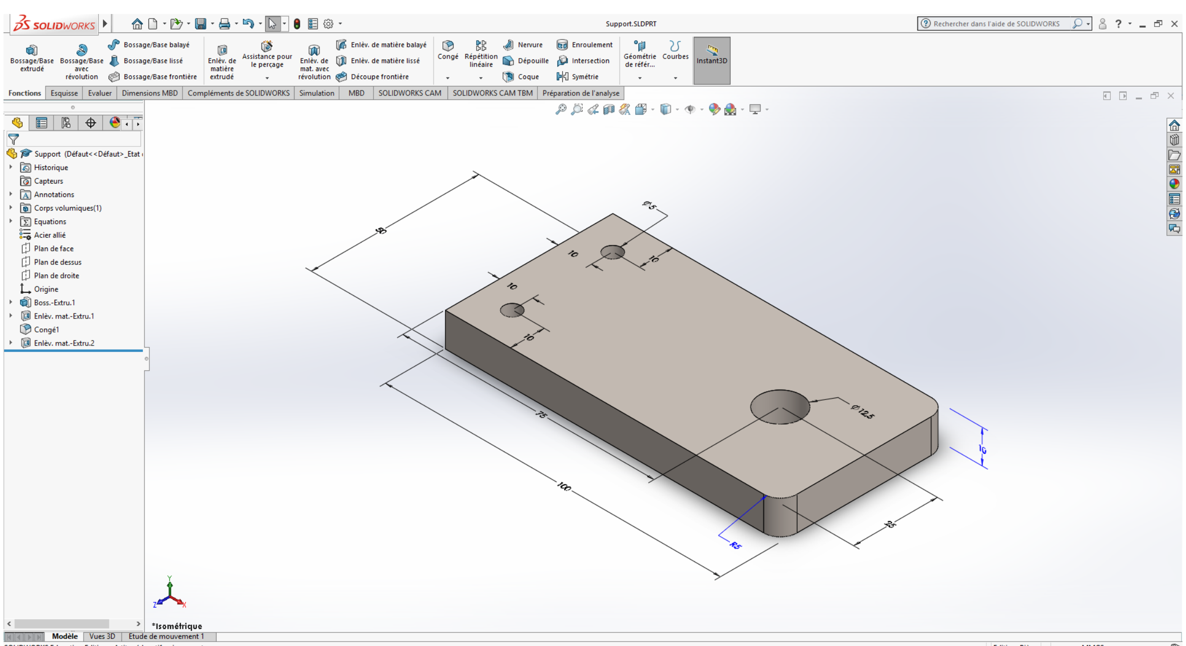
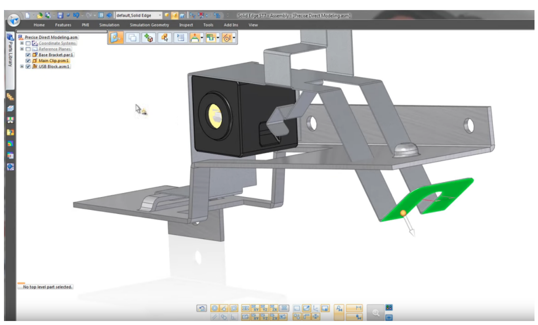
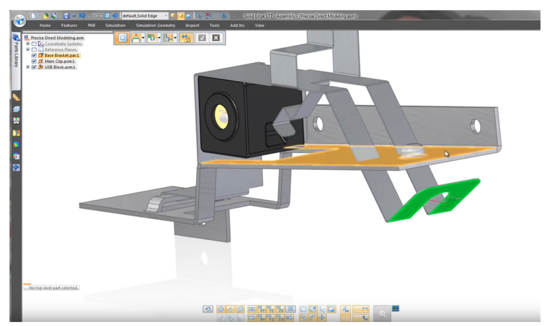


FIGURE 2.13 – Illustration de l'arbre de construction et des paramètres d'une pièce sous *SolidWorks* [50]

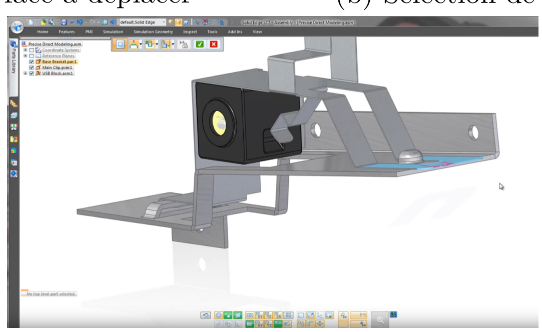
Généralement, la conception d'une pièce est réalisée selon l'approche paramétrique. L'approche paramétrique (Fig. 2.13) permet de créer un modèle qui évolue en fonction des valeurs accordées aux paramètres géométriques et selon les contraintes appliquées aux entités géométriques. Un paramètre peut être une longueur, un angle, une profondeur, un nombre de trous, etc. Une contrainte définit une relation entre deux entités géométriques (parallélisme, concentricité, tangence, etc.). Les paramètres sont définis selon une valeur ou en relation avec un autre paramètre. Un modèle sous l'approche paramétrique est donc constitué d'un ensemble de paramètres et de contraintes qui grandit au fil de son élaboration. Le concepteur peut, au cours du processus de conception, modifier les paramètres ou les contraintes afin d'actualiser le modèle sans avoir à tout redéfinir. L'approche d'édition directe du BREP «*direct modeling*» (Fig. 2.14) peut aussi être utilisée en complément de l'approche paramétrique. L'approche directe est orientée sur le développement de la forme géométrique plutôt que sur ses fonctionnalités. Selon cette approche il est possible d'éditer le modèle BREP d'une pièce notamment en tirant ou en poussant une entité du modèle (face, arête, sommet).



(a) Sélection de la face à déplacer



(b) Sélection de la face d'ajustement



(c) Modification du modèle CAO

FIGURE 2.14 – Exemples de d'édition direct du BREP sous *Solid Edge* [51]

2.3.1.4 Discussion sur la modélisation géométrique

La CAO comporte de nombreuses fonctionnalités destinées à faciliter la conception de nouveaux produits. Ces fonctionnalités sont centrées sur l'utilisateur en lui offrant un grand niveau d'interactivité. La modélisation géométrique d'une microstructure aléatoire à particules nécessite beaucoup d'opérations géométriques afin de définir les différents constituants. Le processus de modélisation d'une microstructure est donc très différent de celui d'un produit manufacturier, car il doit être automatisé afin de générer le modèle géométrique dans un délai raisonnable. L'utilisation de l'approche paramétrique ou directe n'est pas envisageable pour ce type de modélisation compte tenu du niveau élevé d'interaction avec l'utilisateur. Une approche par programmation des opérations géométriques doit plutôt être employée. Cette approche cadre avec une modélisation automatisée de microstructures puisque les différents paramètres géométriques sont obtenus lors de la génération (Section 2.2.1).

2.3.2 Maillage automatique

La résolution numérique d'un problème mécanique tel que posé dans la section 2.2.3 nécessite la discrétisation du domaine de l'objet à étudier. Cette opération de discrétisation est la génération du maillage. La façon dont le domaine est discrétisé a un impact très important sur la qualité et la validité des résultats de la résolution numérique. La section qui suit vise à présenter un portrait concis, mais éclairé des techniques de maillage et de mettre en évidence leurs avantages et inconvénients. D'abord, les propriétés importantes du maillage sont décrites. Ensuite, les différentes méthodes de maillage sont classées et sommairement présentées.

2.3.2.1 Propriétés d'un maillage

Les éléments géométriques qui forment la discrétisation du domaine Ω sont appelés éléments de maillage K_i. L'ensemble de ces éléments de maillage forme le maillage $\mathcal{T}$ et couvre l'entièreté de Ω. Les éléments de maillage utilisés dans ce projet sont illustrés à la figure 2.15. Pour que la résolution numérique du problème soit valide, le maillage doit être conforme et ses éléments doivent être de bonne qualité.

Conformité

Un maillage est conforme s'il répond à trois critères :

1. L'union de tous ses éléments K_i doit être égale à $\mathcal{T}$;

$$\bigcup_i K_i = \mathcal{T} \tag{2.51}$$

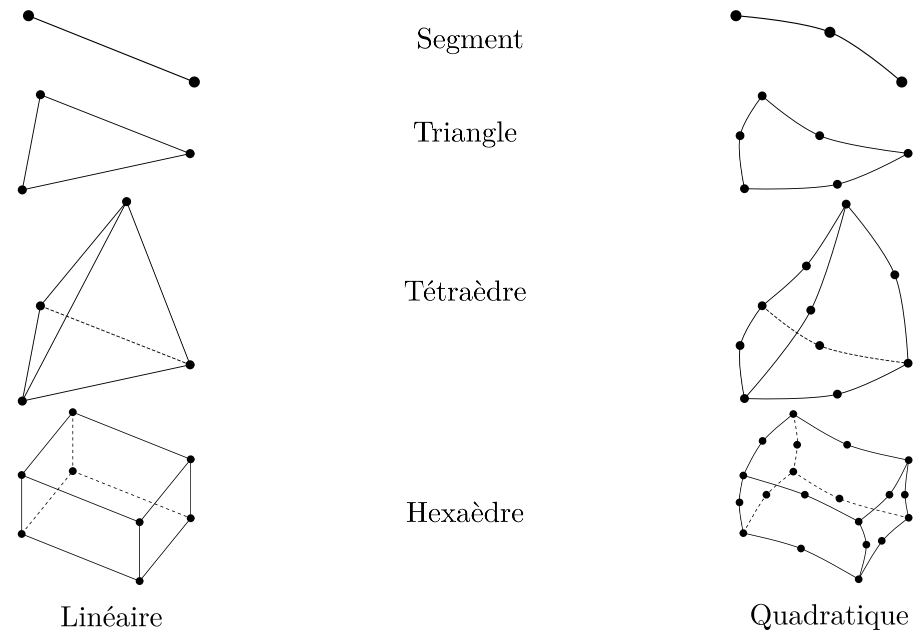


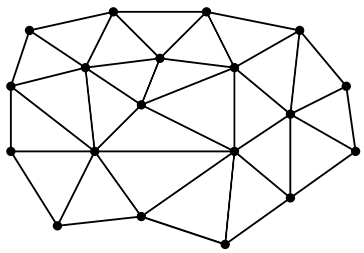
Figure 2.15 – Éléments de maillages utilisés dans ce projet.

2. Deux éléments distincts doivent être soit disjoints, soit adjacents ;

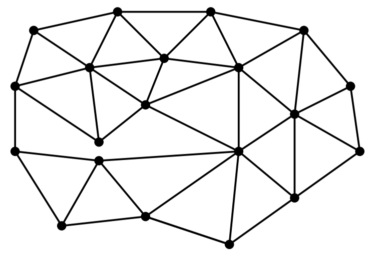
$$\forall i, j \quad i \neq j \quad K_i \cap K_j = \partial K_i \cap \partial K_j \tag{2.52}$$

3. Deux éléments adjacents doivent partager une face, une arête ou un sommet de même degré.

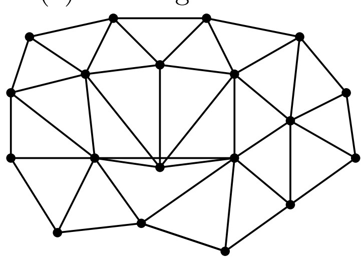
La figure 2.16 illustre les trois critères de conformité. À la figure 2.16b une portion de Ω n'est pas couvert, ce qui est contraire à (2.51). À la figure 2.16c plusieurs éléments se recouvrent, ce qui est contraire à (2.52). Finalement, la figure 2.16d illustre deux éléments partageant un sommet et l'arête d'un troisième élément.



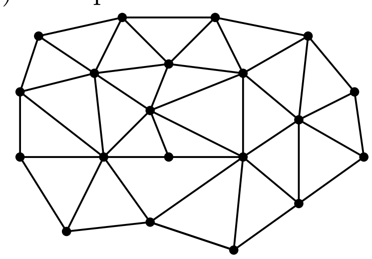
(a) Maillage conforme



(b) Une partie de Ω non couverte



(c) Recouvrement d'éléments



(d) Éléments adjacents incorrects

FIGURE 2.16 – Exemples de conformités et non-conformités d'un maillage 2D.

Écart nodal et densité nodale

L'écart nodal est la mesure de la distance entre deux nœuds d'un élément K notée E_K. L'écart nodal global E_n spécifie l'écart nodal à respecter pour tout le domaine. La densité nodale d_n est l'inverse de l'écart nodal.

$$d_n = \frac{1}{E_n} \tag{2.53}$$

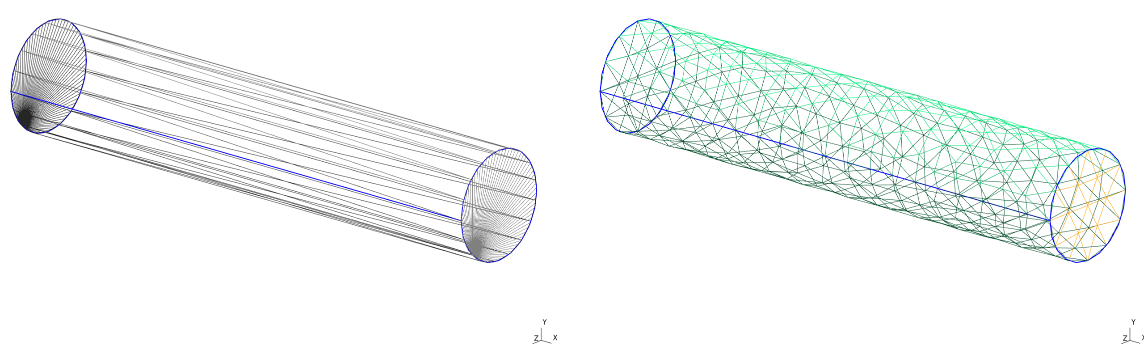
Carte de taille

La carte de taille $\mathcal{M}_t$ est un outil qui spécifie l'écart nodal en tous points de Ω. $\mathcal{M}_t$ peut être exprimée de façon isotrope à l'aide d'un champ scalaire d'écart nodal ou de façon anisotrope à l'aide d'un champ tensoriel de densité nodale. La carte de taille permet de guider le mailleur afin de générer un maillage plus raffiné à certains endroits et plus grossier à d'autres. La carte de taille peut être générée à priori selon différents critères comme le respect de la courbure des éléments topologiques, les concentrateurs de contraintes ou les régions de petite taille [52–54]. Elle peut aussi être générée à posteriori c'est-à-dire après la résolution par EF à l'aide des estimateurs d'erreur [55].

Qualité

La qualité de la discrétisation de Ω influence les résultats de la résolution par la MEF (Section 2.2.3.2). Cette notion de qualité s'applique au niveau des éléments du maillage et au niveau du maillage dans sa globalité.

La qualité d'un élément dépend du contexte auquel elle est associée. Par exemple, la triangulation de visualisation d'un cylindrique peut comporter des triangles très allongés, ce qui permet de minimiser le nombre d'éléments de la tesselation. Ces mêmes triangles allongés conduiraient à des erreurs numériques significatives lors d'un calcul mécanique (Fig. 2.17).



(a) (b)

Figure 2.17 – Différence entre une triangulation de visualisation et un maillage 2D EF. a) Triangulation pour la visualisation. b) Maillage 2D EF

Le critère de qualité d'un élément n'est pas non plus le même, d'un type d'élément à l'autre et n'est pas unique. Le critère de qualité $\mathcal{Q}_{tet}$ d'un tétraèdre linéaire composé des nœuds a, b, c, d peut se baser sur le rayon de la sphère inscrite, la longueur du plus grand segment h_{max} et la somme des aires des triangles S_{tet}. Ce critère à l'avantage de se situer entre $[0, 1]$. La taille d'un tétraèdre est quant à elle évaluée par son segment le plus long.

$$\mathcal{Q}_{tet} = \frac{det(\underline{ab}, \underline{ac}, \underline{ad})\sqrt{6}}{h_{max} S_{tet}} \tag{2.54}$$

Le critère peut aussi être calculé à partir de la sommation des longueurs des côtés au cube comme suit :

$$\mathcal{Q}_{tet} = \beta \frac{h_s^3}{V_{tet}} \tag{2.55}$$

où

$$h_s = \sqrt{\sum_{i=1}^{6} L_i^2} \tag{2.56}$$

et L_i représente la longueur d'un côté du tétraèdre, V_{tet} le volume du tétraèdre et β un facteur de normalisation qui fait en sorte que la qualité d'un tétraèdre équilatéral est de un.

La qualité du maillage résulte d'un fin équilibre entre différents facteurs. D'une part, la qualité du maillage dépend de la qualité de ses éléments, plus spécifiquement de la distribution de la qualité des éléments. Un maillage sera de qualité supérieure si la distribution de la qualité des éléments est étroite et centrée vers une valeur de qualité élevée et que tous les éléments respectent la qualité minimale nécessaire à la convergence du solveur. D'autre part, la qualité du maillage se traduit aussi par la qualité d'approximation de Ω. Minimiser la différence entre $\partial\mathcal{T}$ et $\partial\Omega$ c'est-à-dire l'erreur de facettisation ϵ, résulte en une meilleure approximation de Ω, mais nécessite souvent une discrétisation plus fine de Ω résultant en une hausse du nombre d'éléments. La qualité d'un maillage ne repose pas seulement sur un critère géométrique. En effet, un maillage dont les éléments sont de très bonne qualité ne conduira pas nécessairement à des résultats numériques justes. Il faut parfois faire varier l'écart nodal à certains endroits afin de bien capter les phénomènes locaux. Cependant, ce raffinement local entraîne un gradient de taille des éléments, qui à son tour affecte négativement la qualité de ceux-ci, puisqu'il force la génération d'éléments aux formes disproportionnées selon la direction du gradient. Il en résulte ainsi en un équilibre entre la qualité des éléments, la qualité de l'approximation de Ω, la qualité de la simulation et le temps de calcul.

2.3.2.2 Classification des méthodes automatiques de maillage

Les méthodes automatiques de maillage sont des méthodes qui ont pour fonction de discrétiser automatiquement le domaine Ω avec comme seule intervention de l'utilisateur, la définition de la précision de la discrétisation. La définition de la précision de discrétisation peut consister à fournir par exemple :

- Une valeur de l'écart nodal global E_n ;
- Une carte de taille de l'écart nodal $\mathcal{M}_t$;
- Une valeur de l'erreur maximale de facettisation ϵ.

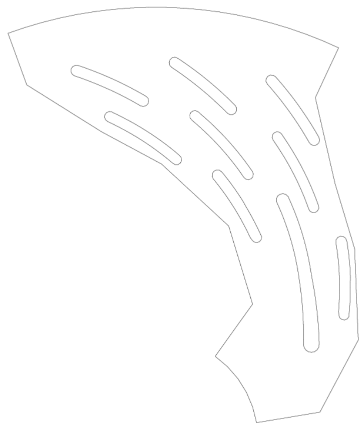
Les méthodes automatiques sont d'intérêt pour la génération du maillage des microstructures de matériaux hétérogènes, car elles n'impliquent pas d'intervention de la part de l'utilisateur, ce qui est nécessaire pour la simulation d'un grand nombre de VES. La section qui suit aborde les différentes méthodes automatiques de maillage en faisant ressortir leurs avantages et inconvénients. Les méthodes de maillage automatiques peuvent être classées selon trois approches, soit la décomposition spatiale (section 2.3.2.3), la triangulation de Delaunay-Voronoï (section 2.3.2.4) et l'approche frontale (section 2.3.2.5). Une brève discussion sur le choix d'une méthode automatique dans le contexte de la modélisation numérique des matériaux hétérogènes est présentée à la section 2.3.2.6.

2.3.2.3 Méthode de décomposition spatiale

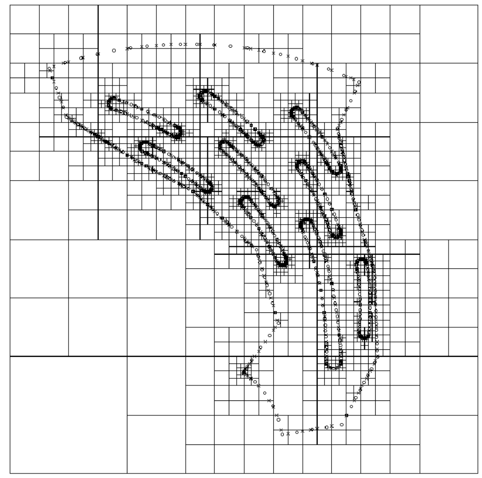
La méthode de décomposition spatiale consiste à partitionner le domaine à mailler en cellules (quadtree en 2D/octree en 3D) obtenues par le raffinement récursif d'une cellule primaire qui est la boîte englobante (en 3D) qui renferme le domaine Ω. L'union de cellules forme le recouvrement du domaine. Afin de minimiser le nombre de cellules, le niveau de décomposition peut être variable, formant une distribution de taille de cellules. Le processus de subdivision prend fin lorsque le critère d'arrêt (taille des cellules, erreur de discrétisation des frontières) est atteint. Une identification des cellules internes et externes au domaine est effectuée afin d'identifier le recouvrement du domaine. Ces cellules sont ensuite décomposées en éléments de maillage pour former le maillage du domaine (Fig. 2.18).

Difficultés et contraintes de la méthode

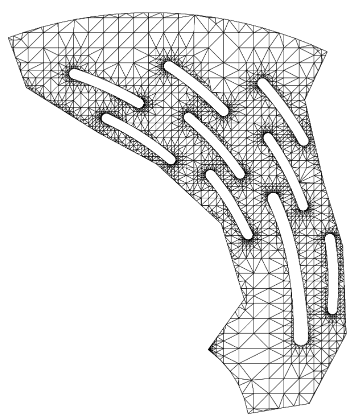
En visant à minimiser le nombre d'éléments de frontière dans une cellule, la méthode de décomposition spatiale tend à subdiviser excessivement les cellules de frontière, géné-



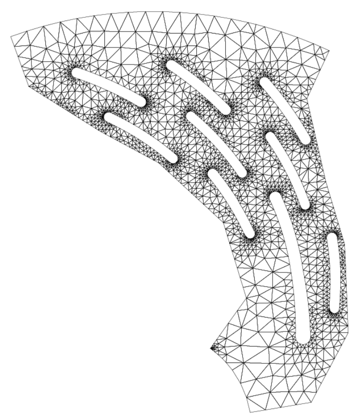
(a) Domaine 2D Ω d'un rotor.



(b) Décomposition spatiale de Ω



(c) Maillage résultant



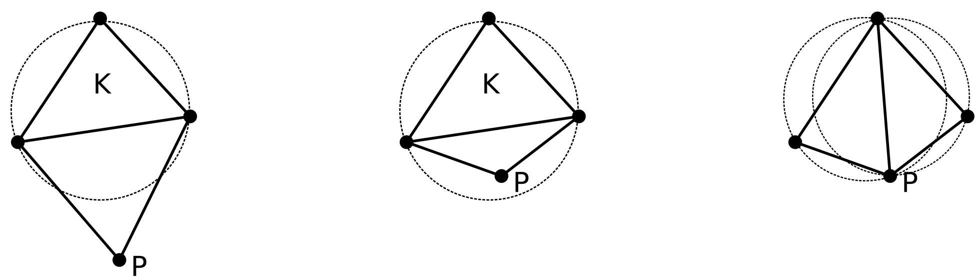
(d) Maillage après optimisation

FIGURE 2.18 – Exemple de maillage par décomposition spatiale [56].

rant par le fait même un maillage trop dense. Si la méthode est contrainte par un critère d'arrêt basé sur un niveau maximal de subdivision, l'étape de maillage des cellules de frontières peut devenir compliquée. Advenant le cas où les frontières du domaine sont représentées de façon exacte, l'étape de maillage des cellules de frontières peut nécessiter la création de cellules à faces ou arêtes courbes. Le traitement de telles cellules peut s'avérer complexe et peut engendrer une dégénérescence des frontières. Il est possible de discrétiser une courbe ou une surface en une série d'arêtes droites ou de faces planes selon une valeur de tolérance donnée. Pour une tolérance suffisamment faible, cette discrétisation peut raisonnablement représenter l'entité géométrique. Cette discrétisation est cependant grandement influencée par la courbure de la frontière, générant ainsi un nombre élevé d'éléments aux endroits où la courbure est grande, ce qui nécessite un niveau de subdivision accru. Ainsi, on retrouve souvent une densité nodale élevée aux abords des frontières. Une fois le maillage généré, il faut très souvent l'optimiser afin d'en améliorer la qualité. En effet, la méthode de décomposition spatiale a un contrôle très limité sur la qualité du maillage lors de la création de celui-ci. Seulement le niveau de subdivision (taille des cellules) et le balancement de l'arbre offrent un certain contrôle sur la qualité et la distribution de celle-ci. Limiter le niveau de subdivision peut cependant occasionner des schémas d'intersection cellule-frontière très complexes à résoudre.

2.3.2.4 Méthode de Delaunay

La méthode de Delaunay permet de mailler l'enveloppe convexe d'un nuage de nœuds en deux ou trois dimensions à l'aide de triangles et tétraèdres. Cette méthode repose sur le critère de Delaunay, qui stipule que le cercle (sphère) circonscrit d'un triangle (tétraèdre) doit être vide et ne doit donc contenir aucun nœud en son intérieur (Fig. 2.19).



(a) (b) (c)

FIGURE 2.19 – Exemple 2D du critère de Delaunay. a) Le critère de Delaunay est respecté, car le nœud P est à l'extérieur du cercle circonscrit de l'élément K. b) Le critère de Delaunay n'est pas respecté, car le nœud P est à l'intérieur du cercle circonscrit de l'élément K. c) Le critère de Delaunay est respecté grâce au changement de topologie du maillage.

La triangulation de Delaunay est obtenue de façon incrémentale en suivant le *Noyau de Delaunay*. Considérant $\mathcal{T}_{\mathcal{D}i}$ la triangulation de Delaunay des premiers i nœuds d'un ensemble de nœuds $\mathcal{S}$ et P le $(i+1)^{\text{ième}}$ nœud le *Noyau de Delaunay* est défini comme suit :

$$\mathcal{T}_{\mathcal{D}i+1} = \mathcal{T}_{\mathcal{D}i} - \mathcal{C}_P + \mathcal{B}_P \tag{2.57}$$

Où $\mathcal{C}_P$ correspond à la cavité définie par l'ensemble des éléments dont le cercle (sphère) inscrit contient P et où $\mathcal{B}_P$ correspond à l'ensemble des éléments formés par la jonction du nœud P avec les arêtes externes (ou faces externes) de la cavité $\mathcal{C}_P$ (Fig. 2.20).

Une triangulation est dite de Delaunay si tous les éléments du maillage respectent le critère de Delaunay. L'insertion des nœuds peut, par exemple, s'effectuer en insérant des nœuds le long de segments existants [57], en insérant les nœuds aux centroïdes des éléments [58] ou selon une méthode frontale [59].

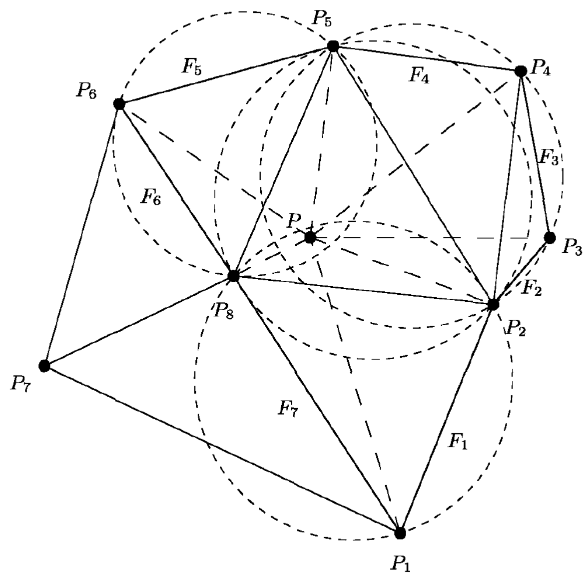


FIGURE 2.20 – Insertion du nœud P permet de définir une cavité $\mathcal{C}_P$, formée par les faces $F_1, F_2, ..., F_7$ et nouveaux ensembles d'éléments $\mathcal{C}_P$, représentés par les lignes pointillées [57].

Difficultés et contraintes de la méthode

L'évaluation de la présence ou non d'un nœud à l'intérieur du cercle (sphère) inscrit d'un élément peut s'avérer délicate si le nœud en question est très près de la périphérie du cercle (sphère). L'erreur numérique peut engendrer une mauvaise interprétation, générant ainsi des éléments qui se superposent.

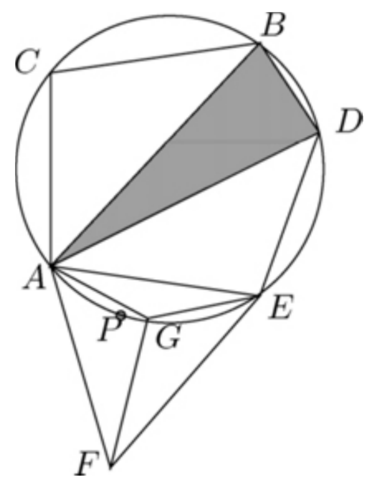


FIGURE 2.21 – Difficultés de la méthode de Delaunay. L'erreur numérique pousse à inclure le nœud G dans la cavité. Tous les triangles de la figure sont sélectionnés hormis le triangle ADB [57].

En 2D, la régénération des frontières (Figure 2.22) s'effectue par l'inversion des diagonales. Cette inversion est effectuée à partir de deux triangles adjacents, formant un quadrilatère, en supprimant la diagonale reliant deux des quatre nœuds et en créant une nouvelle diagonale reliant les deux autres nœuds (Figure 2.23). Suite à cette inversion, les deux éléments impliqués ne respectent plus le critère de Delaunay.

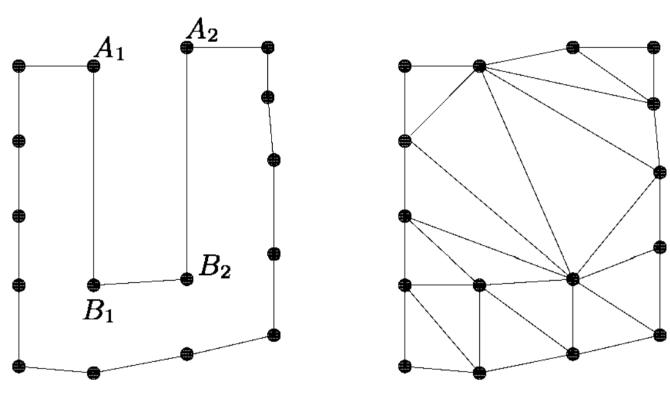


FIGURE 2.22 – Problématique de la régénération des frontières. Les frontières A_1B_1 et A_2B_2 sont manquantes, malgré le fait que leurs nœuds soit présents [57].

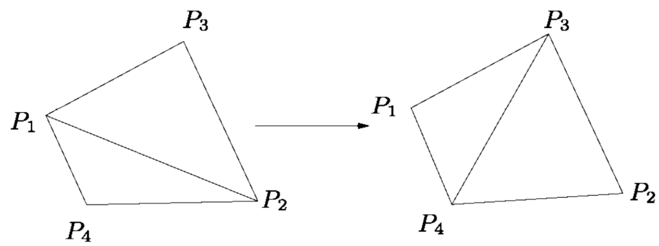


FIGURE 2.23 – Exemple d'inversion des diagonales [57].

La régénération des frontières en trois dimensions peut cependant s'avérer plus délicate, car lorsque tous les nœuds ont été insérés, il est possible que certaines arêtes ou faces de la frontière n'existent pas, nécessitant ainsi plusieurs opérateurs pour retrouver la frontière. La convergence de la régénération des frontières n'est pas assurée en trois dimensions.

2.3.2.5 Méthode frontale

La méthode frontale, contrairement à la méthode de Delaunay, est heuristique puisqu'elle ne repose pas sur des justifications théoriques et sa stratégie de maillage varie selon les auteurs [57, 60–64]. Cette méthode est cependant très efficace et génère un maillage surfacique ou volumique de bonne qualité. En 2D, un front est composé d'une liste segments et en 3D, d'une liste de triangles. La méthode débute d'abord par la discrétisation des frontières du domaine à mailler en segments ou faces. Par la suite, la méthode sélectionne un segment ou une face créée précédemment et crée un nouveau nœud ou sélectionne un nœud existant afin de construire un nouveau triangle ou tétraèdre. Ainsi, tous les éléments du front sont balayés l'un après l'autre et le front progresse vers l'intérieur du domaine. La méthode prend fin lorsque tout le domaine est maillé. L'un des avantages de cette approche est le maintien de l'intégrité des frontières, puisque la discrétisation de ces frontières forme les fronts initiaux (Fig. 2.24).

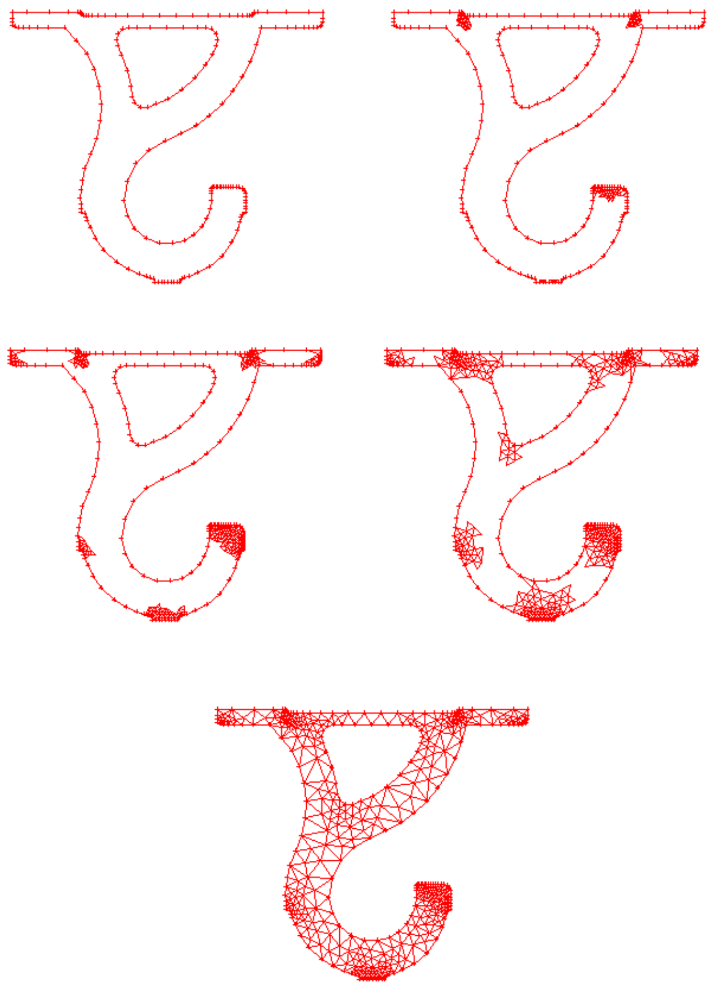


FIGURE 2.24 – Évolution du mailleur frontal en 2D [65].

Le critère de sélection d'un élément de front peut se baser sur certaines propriétés spécifiques de l'élément comme l'orientation, la longueur, la surface et même de façon aléatoire. Le choix de ce critère influence la progression de la méthode et peut donc être considéré selon un objectif spécifique. Par exemple, le choix de l'élément de front le plus petit (longueur ou surface) dans la liste peut permettre d'éviter la création d'éléments de grande taille dans une région où la consigne impose une taille plus petite (Fig. 2.25). Cette approche est pratique lorsque la carte de taille impose une variation rapide de la taille des éléments dans une région donnée. Un autre choix pourrait être de sélectionner l'élément de front de moins bonne qualité afin de maximiser la qualité de l'élément créé à partir de ce front. Finalement, le choix peut être orienté afin d'améliorer la performance de la méthode. En choisissant un élément situé près d'un élément créé précédemment, il est possible d'utiliser les informations locales, auparavant utilisées, afin de vérifier plus rapidement la validité d'un futur élément de maillage.

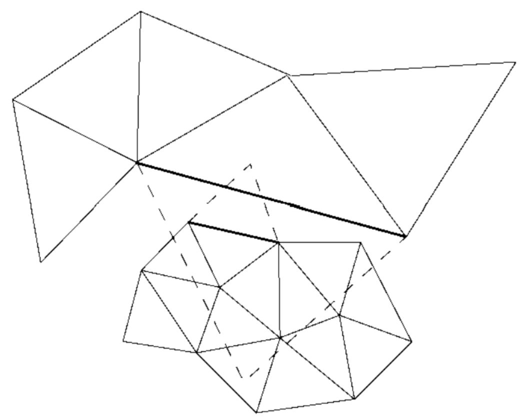


FIGURE 2.25 – Deux éléments de front de taille différente se rapprochant [57].

En deux dimensions, la position du nœud optimal peut être celle qui permet la création d'un triangle équilatéral (Figure 2.26). En trois dimensions, la position peut être déterminée afin de créer un tétraèdre régulier. Dans ce cas, la position est établie à partir du critère de qualité de l'élément. Cette approche est valable pour un maillage de taille régulière, mais devient problématique si une carte de taille est imposée. Afin de satisfaire à la fois les critères de qualité et de taille, un compromis doit être fait entre la position du nœud qui maximise la qualité et la position qui répond à la taille désirée à l'aide d'un facteur de relaxation.

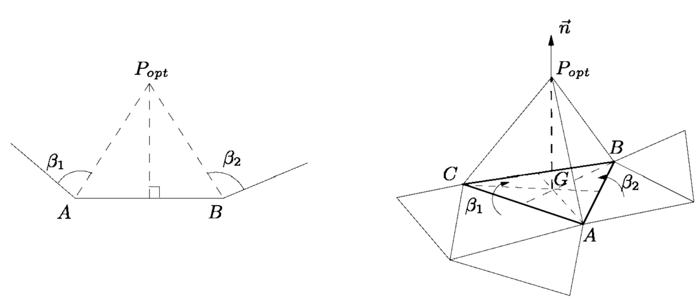


FIGURE 2.26 – Position d'un nœud optimal en 2D et 3D [57].

L'évaluation de nœuds potentiels (Fig. 2.27) est une étape importante de la méthode frontale. En effet, il est estimé qu'en trois dimensions, environ 80% des éléments sont créés à partir de nœuds déjà existants. L'évaluation des candidats s'effectue en vérifiant les nœuds situés à proximité de la position du nœud optimal. Cette évaluation nécessite donc l'utilisation fréquente de l'espace de voisinage. Une fois la liste des candidats établie, ils sont classés en ordre croissant de distance par rapport au nœud optimal.

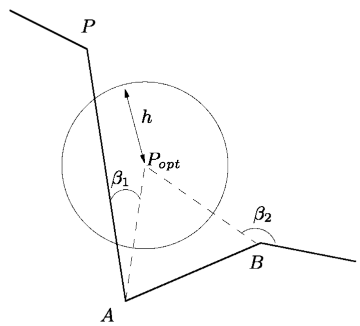


FIGURE 2.27 – Identification des candidats potentiels : à gauche, aucun candidat, à droite quatre candidats [57].

Difficultés et contraintes de la méthode

La méthode frontale converge lorsqu'elle complète le maillage du domaine, c'est-à-dire lorsque l'union de tous les éléments couvre le domaine. En deux dimensions, la méthode frontale converge toujours en un nombre fini d'itérations. Ce résultat est directement relié au fait qu'un domaine défini par un polygone qui ne se croise pas peut être triangulé sans l'ajout de nœuds internes. Ainsi, à chaque moment, la méthode peut être arrêtée et les régions peuvent être triangulées. En trois dimensions, il est parfois possible que les fronts forment un polyèdre qui ne peut être maillé sans l'ajout d'un nœud interne. Une stratégie de choix de nœuds candidats, différente de celle utilisée normalement doit alors être envisagée. La destruction locale d'éléments peut aussi être une solution envisageable. Détruire localement des éléments permet au front de progresser et possiblement d'éviter l'impasse.

Lors de l'étape de validation, il est nécessaire de vérifier si l'élément créé intersecte un ou des éléments déjà existants. Si cette étape de vérification n'est pas implémentée de façon optimale (par exemple, vérifier si l'élément intersecte tous les éléments du maillage), elle peut devenir très lourde et lente. La connaissance des éléments voisins permet d'alléger le nombre de tests d'intersection, mais requiert l'utilisation fréquente d'un espace de voisinage.

2.3.2.6 Discussion sur les méthodes de maillage automatique

Les trois méthodes de maillage automatique présentées ci-dessus comportent chacune leurs avantages et inconvénients. Dans le contexte du maillage d'une microstructure à particules, il est important de rappeler que les particules peuvent être de forme quelconque, être séparées l'une de l'autre d'une distance variable et peuvent avoir des contrastes élevés de propriétés mécaniques par rapport à la matrice. Ces trois facteurs peuvent engendrer des gradients d'écart nodal importants. La méthode de maillage par décomposition n'est pas la méthode idéale lorsqu'il y a une forte variation de l'écart nodal, car cela entraîne un niveau élevé de subdivisions des cellules, qui par le fait même, génère des maillages trop denses. La méthode de Delaunay, quant à elle, doit retrouver les frontières des volumes suite à la triangulation, ce qui peut s'avérer compliqué dans certains cas. Selon les trois critères mentionnés, la méthode frontale est la méthode qui est la plus appropriée pour le maillage des microstructures à particules, car elle s'adapte bien aux variations d'écart nodal et assure l'intégrité des frontières.

2.3.3 Approche intégrée CAO-MEF

Historiquement, le développement des différentes méthodes de modélisation géométrique (Section 2.3.1), de génération de maillage (Section 2.3.2) et de calcul par la méthode des éléments finis (Section 2.2.3.2) était effectué séparément. Cette segmentation des différentes étapes de l'analyse numérique d'un solide faisait en sorte que peu de liens étaient créés entre les étapes. Le concepteur devait dessiner la géométrie de la pièce, importer cette géométrie dans un logiciel de maillage pour finalement exporter le maillage vers un solveur EF. Tout retour en arrière était difficile, voire impossible. Ainsi, si le concepteur souhaitait modifier la géométrie de la pièce en fonction des résultats EF il devait recommencer toutes les étapes de la géométrie jusqu'au calcul. Afin d'accélérer le développement numérique des structures, beaucoup d'efforts furent consacrés pour intégrer les différentes étapes de modélisation entre elles. Les logiciels de CFAO modernes intègrent maintenant le modeleur CAO, les outils de maillage et le solveur EF. De plus, la transition entre chaque module est de plus en plus automatisée. Le *Modèle de Topologie Unifié* (MTU) [66] suit cette intégration. Ce modèle intègre non seulement les différents modules, mais établit aussi une communication bidirectionnelle entre ceux-ci.

Les sections qui suivent présentent l'intégration des outils de modélisation géométrique (section 2.3.3.1), des outils de maillage (section 2.3.3.2) et du solveur EF (section 2.3.3.3). Un portrait global de l'architecture du MTU est présenté à la section 2.3.3.4.

2.3.3.1 Outils de modélisation géométrique

Encapsulation du modeleur CAO

Depuis les dernières années, les modeleurs CAO ne cessent d'évoluer et de nouveaux logiciels sont développés. La dépendance à un modeleur CAO peut être limitative et peut restreindre l'utilisation de nouveaux développements. Afin de contrer cette situation, le MTU met en pratique la notion d'encapsulation afin d'interagir indépendamment avec différents modeleurs CAO. Du point de vue du MTU, les différentes fonctions d'un modeleur CAO ne sont définies qu'une seule fois, mais peuvent être implémentées selon différents modeleurs CAO, grâce à l'encapsulation. Ainsi, si un changement de CAO survient, il n'est pas nécessaire de tout réécrire le modèle, seulement l'encapsulation doit être redéfinie.

La connexion entre le modeleur CAO externe et le MTU est établie en liant par références les entités topologiques du MTU avec les entités topologiques externes et en encapsulant les entités géométriques externes dans les entités géométriques de la MTU (Fig. 2.28).

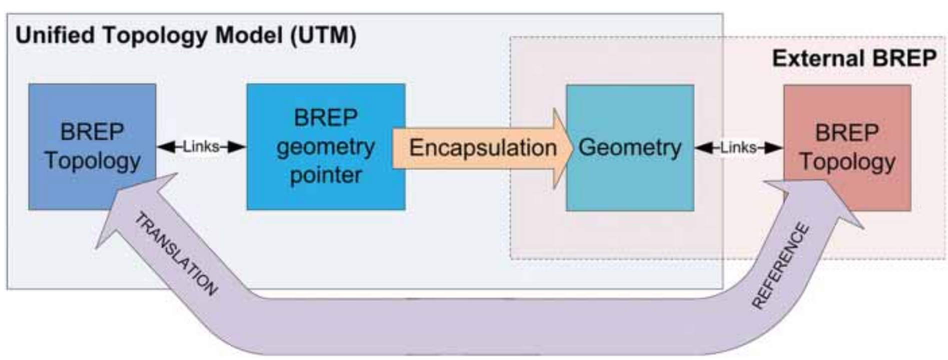


Figure 2.28 – Liaison de la topologie et encapsulation de la géométrie présente dans le MTU [66].

Concept d'entité de co-topologie

Le modèle BREP d'un volume, tel que défini à la section 2.3.1.2, implique une redondance des entités topologiques de type sommet et arête. La figure 2.29 illustre la problématique de redondance. Deux faces adjacentes partagent une même arête et deux arêtes adjacentes partagent un même sommet.

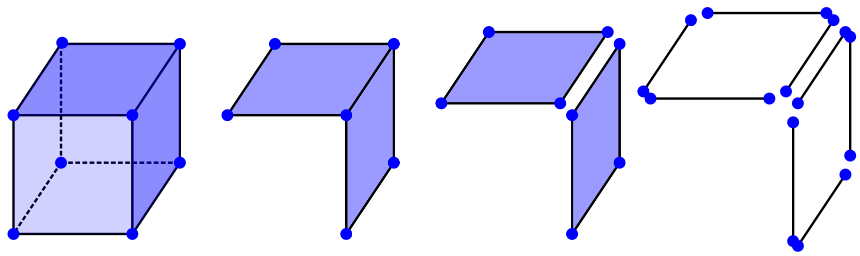


FIGURE 2.29 – Illustration de la redondance des entités topologiques. L'arête commune à deux faces adjacentes du cube est définie dans les deux faces.

Le problème de redondance des entités topologiques est résolu à l'aide des entités co-topologiques. L'entité co-topologique pointe directement vers l'entité topologique auquel elle est associée et contient un paramètre qui spécifie l'orientation (section 2.3.1.2) qui doit être respectée. Par exemple, l'arête qui relie deux faces sera représentée par une seule entité topologique et par deux entités co-topologiques qui auront chacun une orientation correspondante à l'orientation que doit suivre la boucle. Plus encore, cette boucle contiendra non pas une liste d'arêtes, mais plutôt une liste de co-arêtes. Ainsi les entités topologiques sont représentées qu'une seule fois dans le BREP. La plupart de logiciels de CAO commerciaux applique le concept de co-topologie qu'au niveau de la co-arête. Cette limitation pose problème lors de la représentation de deux volumes partageant une même face.

Le MTU utilise le concept d'entités co-topologiques et prévoit les types suivants :

1. Co-sommet (CS)
2. Co-arête (CA)
3. Co-face (CF)

Le même principe est appliqué avec la co-face. Cette dernière est dotée d'un paramètre d'orientation qui spécifie le sens du vecteur normal à la face. Ainsi une même face peut représenter la topologie d'une face commune à deux volumes et, grâce aux co-faces, l'orientation propre à chaque co-face est préservée ce qui permet de discerner l'intérieur de l'extérieur des deux volumes selon la convention de la normale sortante. La figure 2.30 illustre en détail le concept de co-topologie implémenté dans le MTU.

Utilisé lors de la génération du maillage, le concept d'entité co-topologique permet de ne mailler qu'une seule fois les entités topologiques. En effet, le mailleur ne maille que les entités topologiques. Ainsi, une face commune à deux volumes aura un seul et même maillage. Il en va de même pour les sommets et arêtes. Ce concept est avantageux pour la génération du maillage de microstructures à particules, car il lève toute ambiguïté quant à savoir si les entités topologiques communes d'une particule et de la matrice ont été maillées en double, comme cela peut être le cas avec le modèle BREP tel qu'il est souvent accessible dans les solutions commerciales.

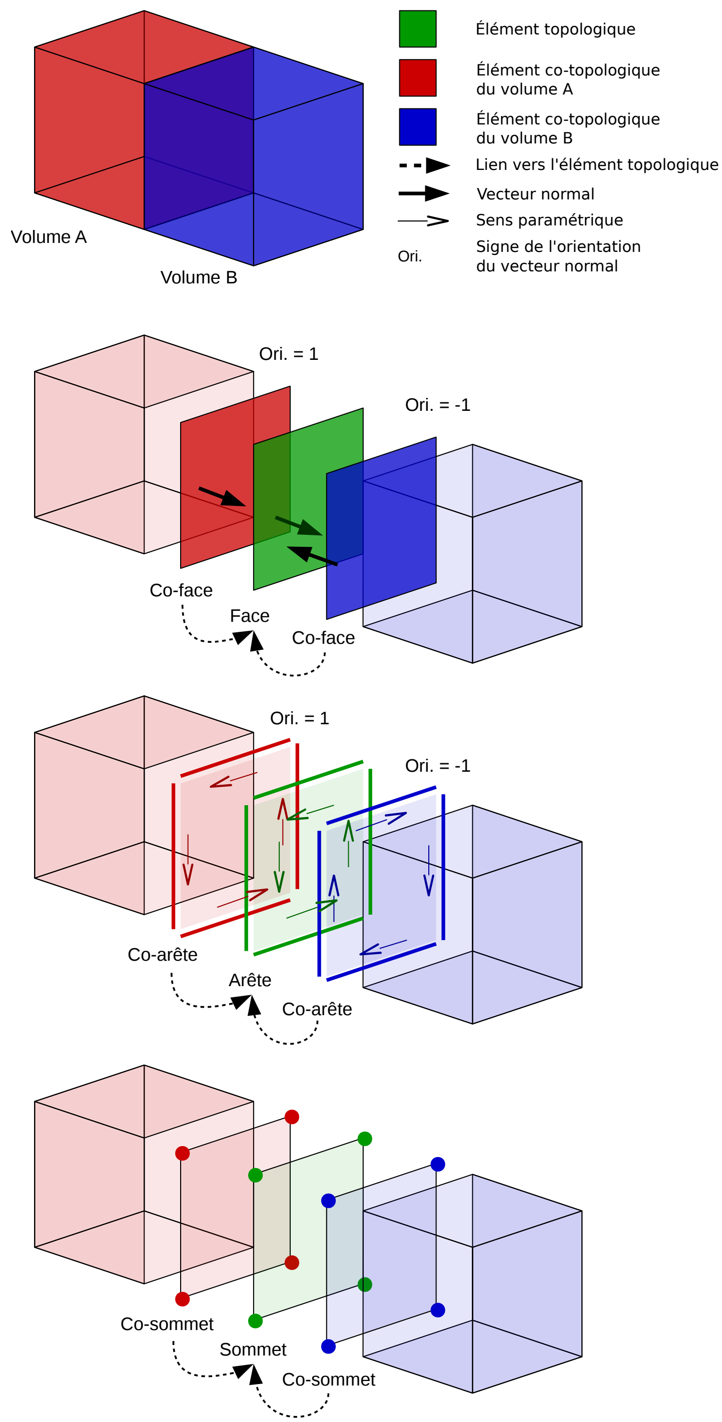


FIGURE 2.30 – Illustration du concept de la co-topologie. Deux volumes partagent une même face. La direction normale de la face commune est respectée pour chaque volume grâce aux co-faces. L'orientation paramétrique des arêtes communes est préservée grâce aux co-arêtes et les sommets communs sont définis qu'une seule fois grâce aux co-sommets.

2.3.3.2 Outils de maillage

Les outils nécessaires à la génération du maillage du modèle géométrique sont intégrés dans le MTU sous la forme de librairies. Le développement de ces outils est basé sur l'approche de programmation «orienté-objet». Cette approche facilite la recherche et le développement de nouveaux algorithmes en offrant la possibilité d'utiliser et d'adapter les outils existants. Le MTU intègre plusieurs algorithmes de calcul de carte de taille [67], de maillage automatique [62–64] et de remaillage [68].

La génération du maillage suit la hiérarchie du modèle BREP et chaque élément de maillage est associé à une entité topologique par un lien bidirectionnel. La génération du maillage débute par la création de nœuds sur les sommets. Ensuite les arêtes sont discrétisées en segments. Les faces sont maillées à l'aide d'une méthode frontale surfacique en partant de la discrétisation des arêtes formant le contour. Finalement le volume est maillé en tétraèdres par une méthode frontale volumique à partir des triangles des faces formant l'enveloppe.

2.3.3.3 Solveur EF

La liaison avec le solveur EF est une liaison «par fichier». Les échanges entre le MTU et le solveur EF sont réalisés par l'écriture de fichiers lisibles par le solveur EF et par la relecture des fichiers de sortie. Ce type de liaison permet de changer de solveur EF sans avoir à réécrire le cœur du MTU.

Le lien entre les entités topologiques et les éléments de maillage simplifie grandement l'élaboration de la simulation. Généralement, l'approche de modélisation utilisée par les logiciels d'EF commerciaux nécessite de créer des groupes de nœuds et d'éléments pour ensuite leur appliquer des propriétés de matériaux et des conditions aux limites. L'approche mise de l'avant dans le MTU est d'appliquer les propriétés des matériaux et les conditions aux limites sur les entités topologiques. Via le lien entre les entités topologiques et les éléments de maillage, les différents groupes de nœuds et d'éléments sont automatiquement créés et les propriétés et conditions aux limites leur sont directement imposées. Le MTU génère automatiquement les fichiers nécessaires à la réalisation de la simulation et l'exécute. Une fois le calcul terminé, les résultats sont importés dans le MTU et associés aux éléments de maillage.

2.3.3.4 Architecture du MTU

Tel que mentionné précédemment, le MTU relie les outils de la modélisation géométrique, les outils de maillage et le solveur EF. La figure 2.31 illustre la liaison entre ces différentes entités. Les propriétés des matériaux, les propriétés de sections (pour les poutres et les plaques) et les conditions aux limites sont liées directement avec les entités topologiques. Les différents éléments de maillage sont aussi liés aux entités topologiques. Les entités topologiques sont liées à la géométrie définie dans le modeleur CAO extérieur. Finalement, la liaison entre les différents types d'entités topologiques est assurée grâce aux entités co-topologiques.

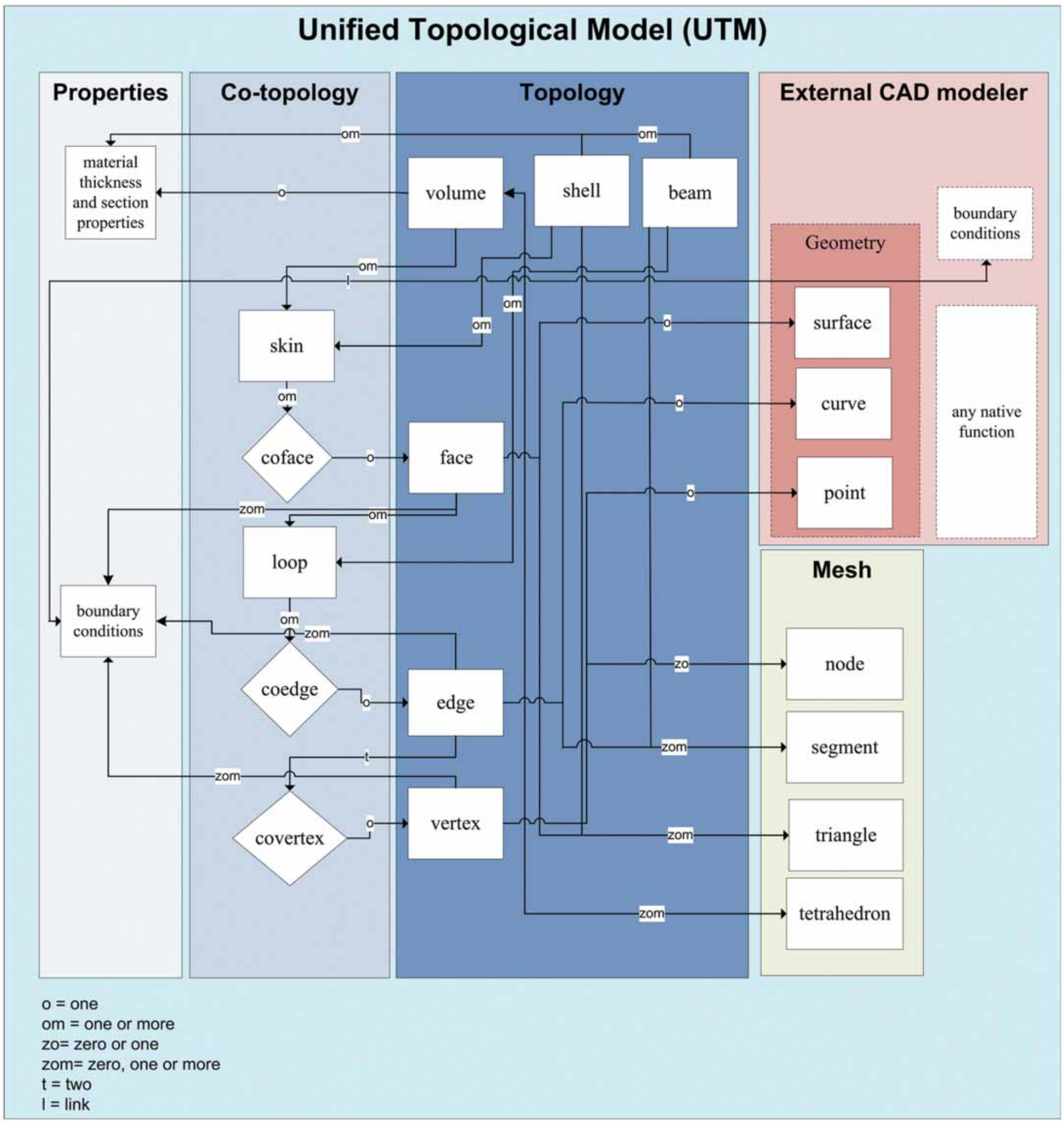


Figure 2.31 – Illustration de l'architecture du MTU [66].

2.3.4 Analyse de l'approche intégrée

La modélisation numérique d'un matériau hétérogène à particules plongées dans une matrice requiert l'utilisation de plusieurs outils afin d'effectuer les étapes de représentation, de localisation et d'homogénéisation communes à la démarche de modélisation par changement d'échelle (section 2.1). Cette démarche de modélisation par changement d'échelle doit être effectuée sur une multitude de VES afin d'obtenir une représentation statistique réaliste du comportement du matériau. La description géométrique de la microstructure doit représenter fidèlement le matériau à l'échelle mésoscopique et le nombre d'hétérogénéités doit être suffisamment grand pour que le comportement effectif soit représentatif, mais suffisamment petit pour que le niveau de complexité de l'étude soit accessible. Enfin, l'évaluation juste du comportement du milieu homogène équivalent exige une description précise des champs locaux à l'échelle mésoscopique.

La démarche de modélisation numérique des matériaux hétérogènes a fait l'objet de nombreux travaux (section 2.2). Les différentes approches proposées sont pour la plupart orientées vers une application spécifique de la méthode (particules sphériques, cylindriques, polycristaux, etc.). Cette orientation spécifique restreint la portée de ces approches. Cette restriction est observable par l'absence d'une utilisation concrète des outils de la CAO lors de la modélisation géométrique des microstructures. Les approches existantes utilisent des formes de particules prédéfinies et dévier de ces formes est difficile voire impossible.

L'intégration de la CAO dans la modélisation numérique des matériaux hétérogènes nécessite une expertise en modélisation géométrique, mais également en génération automatique de maillage et en MEF. L'absence de cette combinaison d'expertise (CAO, maillage, MEF) explique le faible niveau d'intégration des outils de la CAO avec la MEF dans les logiciels destinés à la recherche. Cela explique aussi les nombreuses approches de maillage spécifiques à certains types de microstructures et l'absence d'une approche généralisée. Les outils de la CAO, de maillage et les solveurs EF sont accessibles. Ce qui pose problème c'est l'interaction entre ces différents outils. Le modèle géométrique multi-volume d'une microstructure est difficile à traiter correctement avec les librairies de maillage. La construction d'une carte taille nécessite un accès direct aux entités du modèle géométrique ce qui requiert un accès aux outils internes de la librairie de maillage. L'interface particule/matrice doublement représentée dans le modèle géométrique peut occasionner une double discrétisation des faces et la non-conformité du maillage. L'étude EF nécessite la création de groupes de nœuds et d'éléments selon les partitions du maillage des particules et de la matrice et la création d'une procédure qui décrit au solveur le déroulement de l'étude. Finalement, chaque étape de la génération jusqu'à l'étude EF doivent être effectuée avec un minimum d'interventions de l'utilisateur à cause du grand nombre de réalisations de VES nécessaire à la représentativité statistique du comportement du matériau. Une approche au «cas par cas» n'est pas envisageable. La généralisation de l'étude numérique des microstructures par la MEF nécessite l'intégration des outils de la CAO, de maillage et de la MEF.

Le modèle de topologie unifié (section 2.3.3) intègre complètement les outils de la CAO, de maillage et de la MEF. L'accès aux outils de modélisation géométrique via l'encapsulation du modeleur CAO permet de créer et d'interagir avec les entités du modèle géométrique et le concept de co-topologie offre une solution élégante au problème de la double représentation de l'interface particule/matrice. Le libre accès des outils de la CAO et leur intégration aux outils de maillage offre la possibilité de créer une carte de taille qui n'est pas liée à une forme de particule spécifique. Les méthodes de maillage automatique de modèle géométrique du MTU sont des méthodes documentées, robustes et éprouvées. Elles offrent la possibilité d'établir une procédure de maillage généralisée à plusieurs types de microstructure. Le lien entre les entités topologiques et les éléments de maillage et l'encapsulation du solveur EF simplifie grandement la création des modèles numériques.

L'éventail de possibilités offertes par l'intégration de la CAO, des outils de maillage et de la MEF dans le MTU motive le choix de cette approche pour la modélisation numérique des microstructures de matériaux hétérogènes. Le chapitre qui suit présente en détail la méthode de construction automatique du modèle numérique d'une microstructure selon l'approche intégrée.

Chapitre 3

Construction automatique du modèle numérique d'un VES

Ce chapitre présente en détail les différentes étapes de la construction automatique du modèle numérique d'un VES (Fig. 3.1). Cette condition d'automatisation de la construction des microstructures est très importante. Chaque étape est élaborée afin de pouvoir s'enchaîner parfaitement avec la suivante sans l'intervention de l'utilisateur. Les méthodes sont développées dans l'esprit d'une approche de modélisation numérique ouverte. Ainsi, les outils utilisés pour modéliser des microstructures à particules peuvent être réutilisés et/ou améliorés pour d'autres applications.

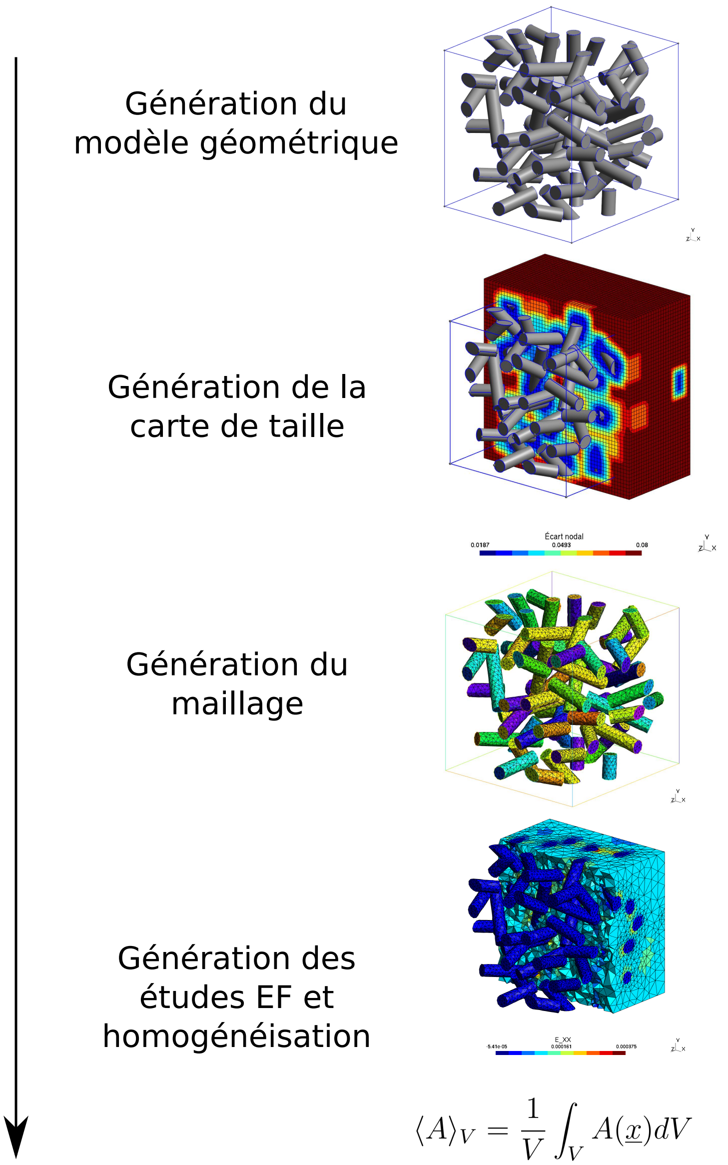


Figure 3.1 – Étapes de la construction automatique du modèle numérique d'un VES

La section 3.1 présente les méthodes de génération du modèle géométrique. La section 3.2 détaille le processus de création et de raffinement de la carte de taille et la section 3.3 présente les étapes de la génération du maillage. L'élaboration des modèles EF et le post-traitement des résultats sont présentés à la section 3.4. Finalement, la mise en application et l'automatisation des étapes de construction sont décrites à la section 3.6.

3.1 Génération du modèle géométrique

La modélisation géométrique de la microstructure à particules est réalisée par programmation d'un arbre de construction évalué (section 2.3.1.3), qui comporte à la fois des outils de la modélisation CSG et de la représentation BREP. Ce modèle est un choix approprié pour la modélisation de ce type de microstructure, puisque les particules sont insérées dans la matrice selon une approche booléenne, qui est un atout majeur du modèle CSG et l'évaluation des frontières fait en sorte que les entités topologiques et géométriques sont accessibles pour la génération du maillage.

Le modeleur CAO, encapsulé dans le MTU, est le modeleur open source *OpenCascade* [69]. Ce modeleur a l'avantage d'être libre, ce qui en fait un choix intéressant pour une application de recherche puisque tous les éléments sont accessibles et documentés. Cette accessibilité permet d'utiliser les opérateurs booléens traditionnels comme l'union, l'intersection et la différence, mais permet aussi d'utiliser les méthodes de redéfinition des frontières utilisées par ces opérateurs.

La méthode de modélisation géométrique est développée autour des approches de génération de microstructure à particules de type *Random Sequential Adsorbtion* (RSA) et de type *Dynamique des Corps Rigides* (DCR). Ces deux méthodes de génération ont des approches très différentes. La méthode RSA est séquentielle tandis que la méthode DCR est concurrente. Idéalement, les deux méthodes sont utilisées sur un domaine de génération Ω_{gen} suffisamment grand pour minimiser les effets du positionnement des particules au bord de Ω_{gen} sur la distribution des particules dans Ω_{VES} (Fig. 3.2). Cependant, en pratique, le positionnement d'une particule dans Ω_{VES} doit respecter certains critères. Le respect de ces critères est nécessaire afin de mener à terme la simulation. Par exemple, la distance d'une particule avec les frontières de Ω_{VES} peut grandement influencer la taille du maillage à cet endroit. Ces différents critères sont regroupés sous un algorithme d'insertion des particules, qui est utilisé dans les deux méthodes de génération.

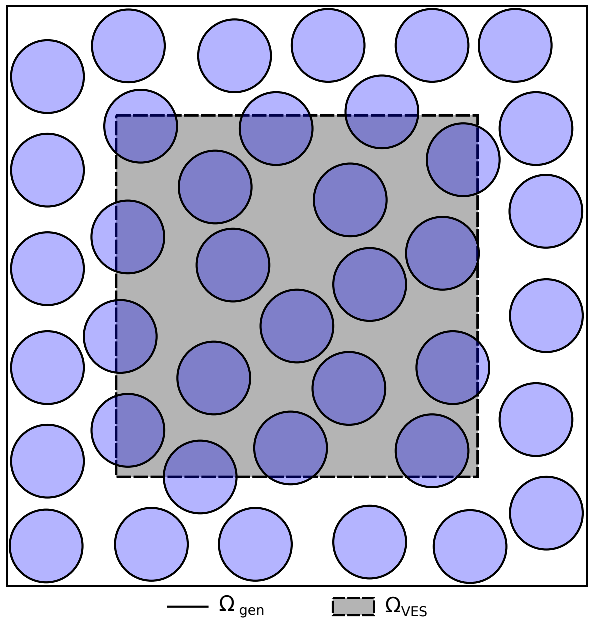
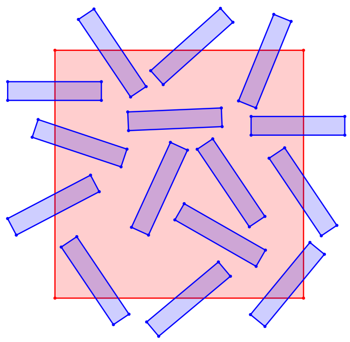


FIGURE 3.2 – Illustration du domaine de génération Ω_{gen} et du VES Ω_{VES}.

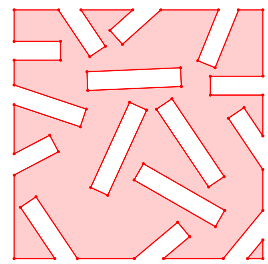
Les différentes opérations géométriques utiles à la génération du VES sont présentées à la section 3.1.1. La génération des éléments co-topologiques du MTU est décrite à la section 3.1.2. L'algorithme d'insertion des particules est présenté à la section 3.1.3 et les méthodes RSA et DCR adaptées à la modélisation géométrique sont précisées aux sections 3.1.4, 3.1.5.

3.1.1 Opérations géométriques

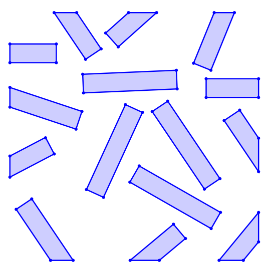
Le modèle géométrique d'une microstructure à particules nécessite la création de plusieurs entités topologiques volumiques soit un volume $V_{\mathcal{P}}$ par particule $\mathcal{P}$ et un ou plusieurs volumes $V_{\mathcal{M}}$ pour la matrice $\mathcal{M}$ (Fig. 3.3a). Si, lors de la génération du modèle géométrique, $\mathcal{M}$ présente des porosités à la place des particules, il faudrait pour chaque porosité effectuer une opération booléenne de différence $-$ de façon à les retirer(Fig. 3.3b). Si inversement, le modèle souhaité était composé d'un enchevêtrement de particules sans matrice, il faudrait pour chaque particule effectuer une opération booléenne d'intersection $\cap$ afin de garder les portions de volumes compris à l'intérieur de $V_{\mathcal{M}}$ (Fig. 3.3c).



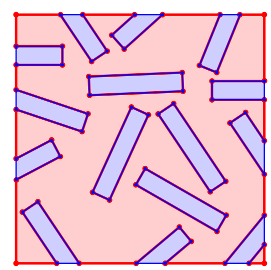
(a)



(b)



(c)



(d)

FIGURE 3.3 – Illustration des opérations booléennes possibles entre les particules (bleu) et la matrice (rouge). a) Particules et matrice séparées. b) Différence $-$ entre la matrice et les particules c) Intersection $\cap$ entre la matrice et les particules. d) Combinaison de la différence $-$ entre la matrice et les particules et l'intersection $\cap$ entre la matrice et les particules.

Le modèle géométrique d'une microstructure à particules enrobées de matrice peut être généré à partir d'une combinaison d'opérations booléennes d'intersection $-$ et de différence $\cap$. D'abord, le volume $V_{\mathcal{P}_i}$ d'une particule $\mathcal{P}_i$ est intersecté par le volume $V_{\mathcal{M}}$ de la matrice $\mathcal{M}$ et donne $V_{(V_{\mathcal{P}_i} \cap V_{\mathcal{M}})}$. Le volume de la matrice est ensuite soustrait du volume de la particule et donne $V_{(V_{\mathcal{M}} - V_{\mathcal{P}_i})}$. Le volume $V_{(V_{\mathcal{P}_i} \cap V_{\mathcal{M}})}$ est finalement ajouté à $V_{(V_{\mathcal{M}} - V_{\mathcal{P}_i})}$ ce qui en résulte en un modèle géométrique à plusieurs volumes (Fig. 3.3d). Chaque $V_{\mathcal{P}}$ possède ainsi des frontières communes avec $V_{\mathcal{M}}$ (selon l'hypothèse qu'il n'y a pas de contact entre les particules). Cependant, comme proposé, les entités topologiques des frontières particules/matrice sont représentées deux fois (Fig. 3.4).

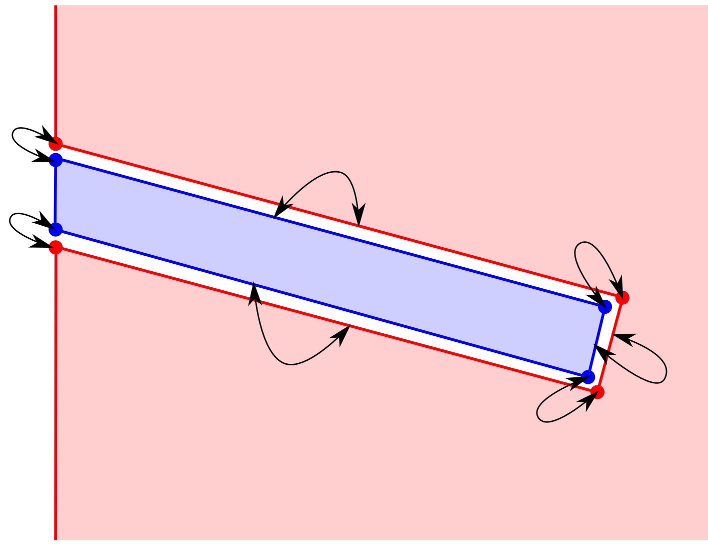


Figure 3.4 – Illustration de la double représentation de la frontière entre une particule et la matrice.

Cette double représentation est problématique lors de l'étape de génération du maillage puisque les frontières doivent être discrétisées une seule fois. Il faut donc établir une correspondance entre les entités topologiques des deux représentations de la frontière commune. Cependant, la séquence de construction présentée ci-haut ne garantit pas que la paramétrisation des entités géométriques des deux représentations de la frontière commune soit la même. Retrouver la correspondance entre les entités topologiques peut donc s'avérer complexe.

La solution au problème de la double représentation de la frontière repose sur l'utilisation des outils de redéfinition des frontières employés par les opérateurs d'union $\cup$, d'intersection $\cap$ et de soustraction $-$. Puisque la bibliothèque *OpenCascade* est libre, il est possible d'accéder directement à ces outils qui sont habituellement cachés dans les bibliothèques commerciales.

Lorsqu'une opération booléenne est effectuée sur deux entités topologiques, le modeleur CAO calcule d'abord les entités de jonctions des deux entités topologiques. Par exemple, lorsque deux arêtes se croisent, un sommet est créé au point de jonction. Lorsque deux faces se croisent, une arête est créée selon l'équation paramétrique de la courbe résultante du croisement des faces. De même des sommets sont créés aux croisements des arêtes qui définissent le contour des deux faces. Lorsque deux volumes se croisent, des faces, arêtes et sommets sont créés aux zones de jonctions. Les entités topologiques initiales sont ensuite redéfinies à partir de ces nouvelles entités de jonctions et selon le type d'opération booléenne, des entités sont préservées et d'autres sont retirées. Cette étape de redéfinition des entités topologiques est utilisée ici sous la forme d'un nouvel opérateur nommé opérateur de fragmentation $frag$. Une illustration d'un cas en 2D du fonctionnement de l'opérateur de fragmentation et des opérateurs booléens est présentée à la figure 3.5.

L'opérateur de fragmentation $frag(V_{\mathcal{P}_i}, V_{\mathcal{M}}))$ est ainsi utilisé pour incorporer le volume d'une particule $V_{\mathcal{P}_i}$ au volume de la matrice $V_{\mathcal{M}}$ tout en assurant que la paramétrisation des entités topologiques communes au volume de la matrice modifiée $V_{\mathcal{M}_{frag(V_{\mathcal{P}_i}, V_{\mathcal{M}}))}}$ et de la particule modifiée $V_{\mathcal{P}_{frag(V_{\mathcal{P}_i}, V_{\mathcal{M}}))}}$ soit identique.

La bibliothèque *OpenCascade* est conçue avec une structure orientée objet. Elle crée une seule représentation d'un objet et utilise des pointeurs pour y faire référence à plusieurs endroits pour ne pas de créer des copies. Il est donc facile de retrouver la correspondance entre les entités topologiques des deux représentations d'une frontière commune puisqu'un seul objet est utilisé. Cette stratégie est utilisée pour générer les éléments co-topologiques du MTU.

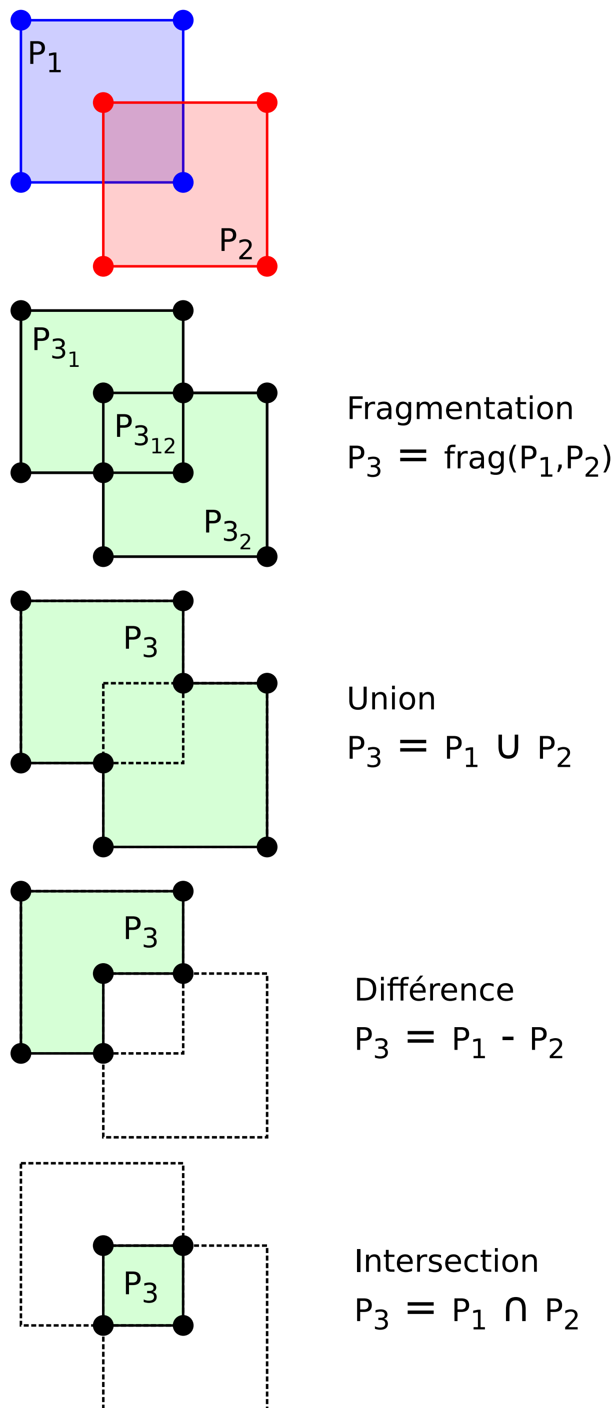


Figure 3.5 – Illustration de l'opérateur de fragmentation $frag$ et des opérateurs d'union $\cup$, d'intersection $\cap$ et de soustraction $-$

3.1.2 Génération des entités co-topologiques

Une entité co-topologique possède un lien direct vers l'entité topologique qu'elle représente et possède une valeur d'orientation qui indique si c'est l'orientation de l'entité topologique qui doit être suivie ou son inverse. Cela permet une seule représentation de chaque entité topologique au lieu de plusieurs copies. Lors de l'importation d'une entité topologique, le MTU doit vérifier si l'entité est déjà représentée. Si c'est le cas, une entité co-topologique est créée et liée à l'entité topologique existante. Si ce n'est pas le cas, l'entité topologique est ajoutée au MTU. La méthode d'importation d'une entité topologique volumique dans le MTU est décrite à l'algorithme 3.1.

Algorithme 3.1 : Méthode d'importation d'un volume dans le MTU

Données : Entité topologique volumique V, liste des entités topologiques présentes dans le MTU $L_{E_{topo}}$

Enveloppe Env de V
pour chaque *Face* $F \in Env$ **faire**
    si $F \in L_{E_{topo}}$ **alors**
        Créer la co-face CF d'orientation inverse à celle de la face existante F_L
    sinon
        Ajouter F à $L_{E_{topo}}$
        Créer la co-face CF de même orientation que F
        Ajouter la boucle B de F à $L_{E_{topo}}$
    Boucle B de F
    Orientation Ori_B de la boucle B
    pour chaque *Arête* $A \in B$ **faire**
        si $A \in L_{E_{topo}}$ **alors**
            Boucle B_L de l'arête existante A_L
            Orientation Ori_{B_L} de la boucle B_L
            si $Ori_B = Ori_{B_L}$ **alors**
                Créer la co-arête CA d'orientation Ori_B
            sinon
                Créer la co-arête CA d'orientation inverse à Ori_B
        sinon
            Ajouter A à $L_{E_{topo}}$
            Créer la co-arête CA d'orientation Ori_B
            Ajouter les sommets S_1 et S_2 de A à $L_{E_{topo}}$
        Créer les co-sommets CS_1 et CS_2 des sommets S_1 et S_2

3.1.3 Algorithme d'insertion des particules

La première étape de l'algorithme d'insertion des particules est de déterminer si une nouvelle particule $\mathcal{P}$ de position $P(x, y, z)$ et d'orientation $Ori(\phi, \theta)$ (Fig. 3.6) peut être insérée tout en respectant des restrictions. La table 3.1 liste les différents critères d'insertion qui sont détaillés plus loin. Si la nouvelle particule peut être insérée, la deuxième étape de l'algorithme consiste à effectuer les opérations géométriques nécessaires à l'ajout de $\mathcal{P}$ au modèle géométrique de la microstructure du VES.

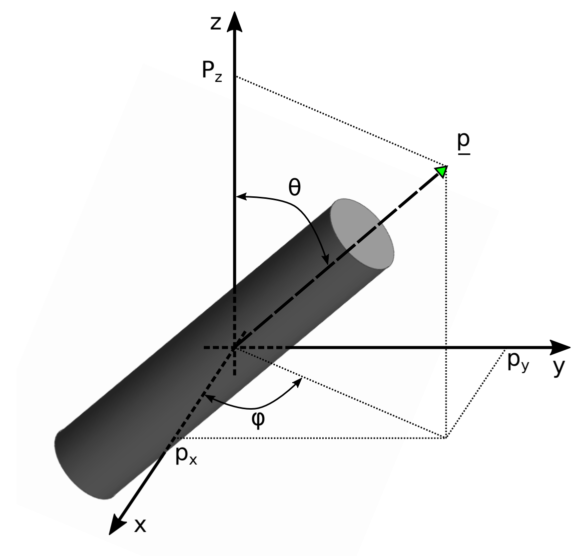


FIGURE 3.6 – Illustration du vecteur d'orientation $\underline{p}$ et des angles ϕ et θ.

TABLE 3.1 – Critères d'insertion d'une particule

Distance minimale entre entités topologiques	$Dist_{min}$
Volume minimum	$Volume_{min}$
Aire minimale	$Aire_{min}$
Longueur minimale	$Longueur_{min}$
Angle minimum entre faces	$Angle_{min}$

3.1.3.1 Critère d'insertion de distance minimale

L'objectif de la méthode de génération de la microstructure est de représenter fidèlement la morphologie du matériau à simuler. Dans le cas des matériaux avec une matrice et des particules, l'une des données importantes à respecter est la distance entre les particules. Si le matériau est composé de particules uniformément réparties et enrobées d'une couche de matrice, la méthode de génération doit respecter une certaine distance minimale $Dist_{min}$ qui sépare les particules les unes des autres. Ce critère de distance est propre à la morphologie du matériau à l'étude. La méthode de génération doit aussi prendre en compte certains aspects de la modélisation numérique, plus spécifiquement du maillage de la microstructure, afin de mener à bien l'étude.

D'un point de vue géométrique, la distance minimale entre deux entités topologiques n'a pas d'incidence sur la validité du modèle géométrique, excepté lorsque cette distance est inférieure à la tolérance de précision du modeleur CAO. Du point de vue de la génération du maillage, c'est spécifique à la méthode des éléments finis. En effet, plus la distance entre deux entités topologiques E_{topo_1} et E_{topo_2} notée $Dist_{E_{topo_1},E_{topo_2}}$ est petite, plus l'écart nodal local E_{loc} doit être petit (Fig. 3.7). Si la zone entre les deux entités topologiques est discrétisée selon la consigne d'écart nodal E_n, les entités générées risquent d'être de mauvaise qualité ou même invalides. Cela peut même affecter la convergence du mailleur. Afin de minimiser la taille du maillage, de préserver sa qualité et d'assurer la convergence du mailleur, le modèle géométrique doit respecter le critère de distance minimale $Dist_{min}$. Le critère $Dist_{min}$ s'applique sur la distance entre les paires d'entités topologiques suivantes :

- Sommet - Sommet ($Dist_{S,S}$)
- Sommet - Arête ($Dist_{S,A}$)
- Sommet - Face ($Dist_{S,F}$)
- Sommet - Volume ($Dist_{S,V}$)
- Arête - Arête ($Dist_{A,A}$)
- Arête - Face ($Dist_{A,F}$)
- Arête - Volume ($Dist_{A,V}$)
- Face - Face ($Dist_{F,F}$)
- Face - Volume ($Dist_{F,V}$)
- Volume - Volume ($Dist_{V,V}$)

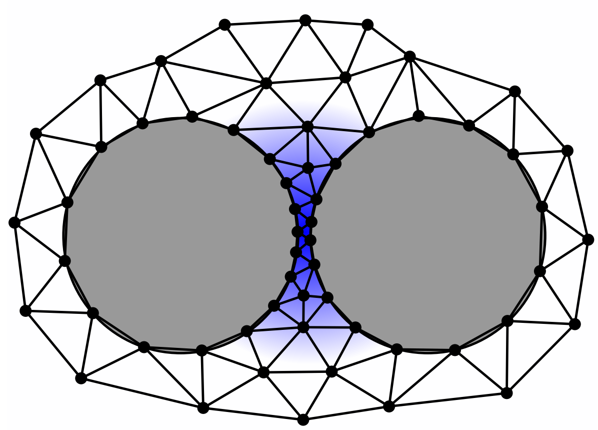


FIGURE 3.7 – Illustration de la discrétisation entre deux particules sphériques proches.

Détection du lien topologique

Le critère de distance minimale est appliqué seulement sur les paires d'entités topologiques (E_{topo_1}, E_{topo_2}) qui n'ont aucun lien topologique. Par exemple, le critère ne sera pas appliqué sur la paire formée d'une face et d'un de ses propres sommets ou sur deux faces reliées entre elles par une arête. L'algorithme 3.2 est utilisé pour déterminer si un lien topologique existe entre (E_{topo_1} et E_{topo_2}).

Algorithme 3.2 : $Lien(E_{topo_1}, E_{topo_2})$: Méthode de détection du lien topologique entre les deux entités topologiques E_{topo_1} et E_{topo_2}

Données : Entités topologiques E_{topo_1} et E_{topo_2} de dimension D_{topo_1} et D_{topo_2}
Résultat : Liste des liens topologiques $Lien_{E_{topo_1},E_{topo_2}}$ entre E_{topo_1} et E_{topo_2}

si $D_{topo_1} == D_{topo_2}$ **alors**
  Lister dans L_{topo_1} toutes les entités topologiques sous-jacentes de E_{topo_1}
  Lister dans L_{topo_2} toutes les entités topologiques sous-jacentes de E_{topo_2}
  si $L_{topo_1} \cap L_{topo_2} \neq \varnothing$ **alors** Ajouter $L_{topo_1} \cap L_{topo_2}$ à $Lien_{E_{topo_1},E_{topo_2}}$
sinon
  si $D_{topo_1} > D_{topo_2}$ **alors**
    Lister dans L_{topo_1} toutes les entités topologiques sous-jacentes de E_{topo_1}
    si $E_{topo_2} \in L_{topo_1}$ **alors** Ajouter E_{topo_2} à $Lien_{E_{topo_1},E_{topo_2}}$
  sinon
    Lister dans L_{topo_2} toutes les entités topologiques sous-jacentes de E_{topo_2}
    si $E_{topo_1} \in L_{topo_2}$ **alors** Ajouter E_{topo_1} à $Lien_{E_{topo_1},E_{topo_2}}$
retourner $Lien_{E_{topo_1},E_{topo_2}}$

Méthodes de détection de proximité

L'évaluation de la distance minimale entre deux entités topologiques est une étape qui doit être effectuée à plusieurs reprises lors de l'évaluation de l'insertion d'une nouvelle particule. C'est d'autant plus le cas avec la méthode de génération RSA qui génère aléatoirement de nouvelles particules. Cette méthode doit donc efficacement déterminer si la distance entre deux entités topologiques est supérieure à $Dist_{min}$.

Pour un nombre de particules très faible, il serait envisageable de vérifier la distance minimale entre une nouvelle particule $\mathcal{P}$ et toutes les particules déjà insérées dans le VES. Cependant, lorsque le nombre de particules augmente, cette approche devient vite très lente. Afin d'évaluer la distance efficacement avec les particules avoisinantes à $\mathcal{P}$, un espace de voisinage utilisée. Cet espace de voisinage est composée de n_x, n_y, n_z cellules où chaque cellule peut contenir des liens vers les entités topologiques, dont la boîte englobante d'une entité topologique l'intersecte. La boîte englobante est calculée en déterminant les extremums de l'entité topologique selon les axes x, y et z du repère global. La position du coin de chaque cellule est convertie en une seule valeur entière qui indique l'emplacement de la cellule dans un vecteur de cellules ce qui permet une recherche rapide. La méthode de détection de proximité $Proxi(G_{topo}, E_{topo}, r)$ par la grille de recherche G_{topo} de l'entité topologique E_{topo} selon une distance de recherche r est décrite à l'algorithme 3.3. La distance de recherche r est 1.1 fois plus grande que la dimension maximale de la boîte englobante de $\mathcal{P}$.

Algorithme 3.3 : $Proxi(G_{topo}, E_{topo}, r)$: Méthode de détection de la proximité d'entités topologiques par grille de recherche

Données : Grille d'entités topologiques présentes G_{topo}, nouvelle entité topologique E_{topo}, distance de recherche r.
Résultat : Liste des entités topologiques L_{topo} à proximité de E_{topo}

```
Création de la boîte de recherche B_r par agrandissement des dimensions de la
  boîte englobante de E_topo de r.
Création de la liste des cellules L_cell intersectées par B_r.
pour chaque Cellules C_i ∈ L_cell faire
    si C_i ≠ ∅ alors
        pour chaque Entités topologiques E_topo_{C_i} ∈ C_i faire
            si L'intersection de la boîte englobante de E_topo_{C_i} intersecte B_r alors
                Ajouter E_topo à L_topo
retourner L_topo
```

La figure 3.8 illustre la méthode de détection de proximité. La méthode débute avec une grille d'entités topologiques G_{topo} qui contient les entités topologiques déjà présentes dans la microstructure, ici représentées par les faces en bleu (Fig. 3.8a). Ensuite, une boîte englobante de recherche B_r est créée à partir de la boîte englobante de la nouvelle entité topologique E_{topo}. Les dimensions de B_r sont augmentées de la distance de recherche r (Fig. 3.8b). La liste des cellules L_{cell} intersectant B_r est obtenue (Fig. 3.8c). Finalement, pour chaque cellule C_i de la liste L_{cell} contenant une entité topologique $E_{topo_{C_i}}$, une vérification d'intersection entre la boîte B_r et la boîte de $E_{topo_{C_i}}$ est effectuée. S'il y a intersection, l'entité $E_{topo_{C_i}}$ est considérée comme étant à proximité de la nouvelle entité topologique E_{topo} (face verte de la figure 3.8d).

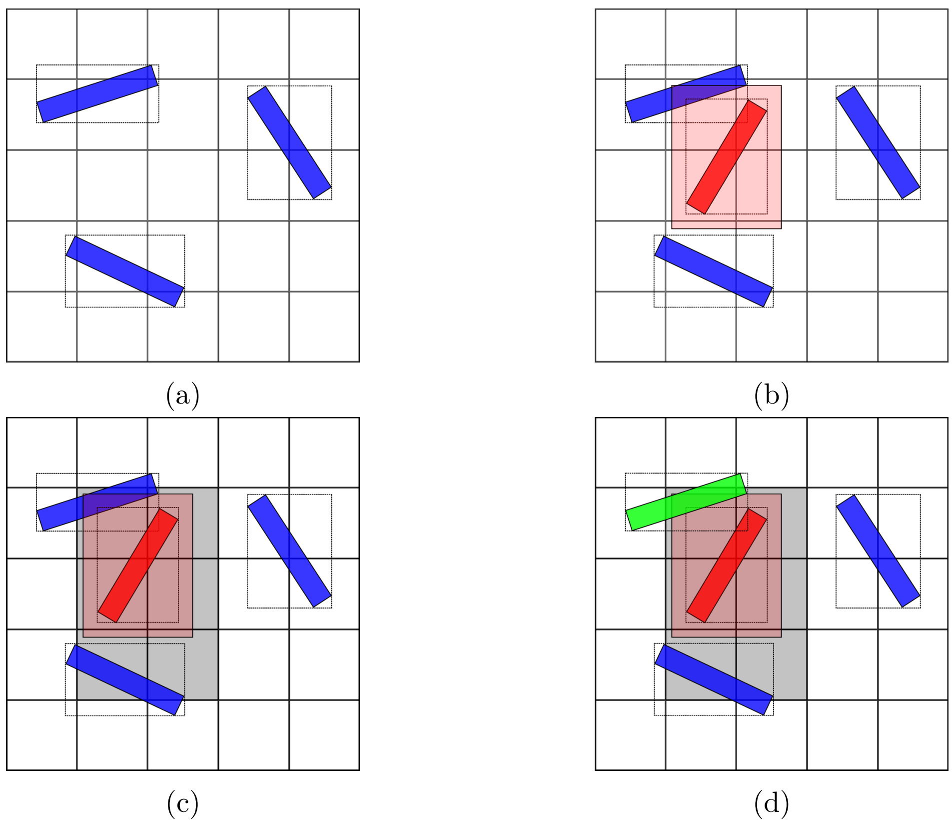


FIGURE 3.8 – Illustration de la méthode de détection de proximité (Algo. 3.3). a) Grille d'entités topologiques G_{topo} contenant les faces en bleu, b) Boîte de recherche B_r de la face en rouge, c) Cellules intersectées par B_r en gris, d) Élément topologique à proximité en vert.

Grâce à la grille de recherche, il est possible de trouver efficacement les entités topologiques à proximité d'une nouvelle entité à insérer. Cependant, cette méthode ne permet pas de connaître précisément la distance entre les entités topologiques. Elle retourne seulement une liste d'entités dont la boîte englobante coupe la boîte de recherche. Puisque les boîtes sont orientées selon les axes du repère global, la distance réelle entre les deux entités topologiques peut être plus grande que la distance qui sépare leurs boîtes.

Calcul de la distance minimale à l'aide des outils CAO

Les outils CAO de calcul de distance, encapsulés dans le MTU, sont utilisés afin de calculer la distance minimale séparant deux entités topologiques. De façon générale la méthode employée pour calculer la distance entre deux entités topologiques paramétriques consiste à minimiser la distance entre deux points $P(u,v)_{E_{topo_1}}$ et $P(u,v)_{E_{topo_2}}$ à l'aide d'une méthode d'optimisation non linéaire souvent de type *Newton*. Cette méthode est itérative et peut dans certains cas, nécessiter plusieurs itérations avant de trouver le minimum absolu de la distance (Fig. 3.9). C'est pourquoi la méthode de recherche par boîtes englobantes est employée avant d'utiliser cette méthode. Le calcul de la distance minimale à l'aide des outils CAO est applicable aux différentes paires d'entités topologiques ($Dist_{CAO_{E_{topo_1},E_{topo_2}}}$) mentionnées plus haut.

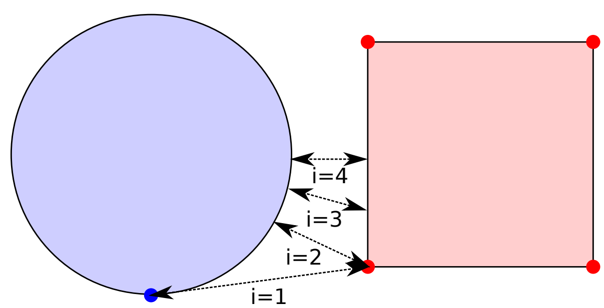
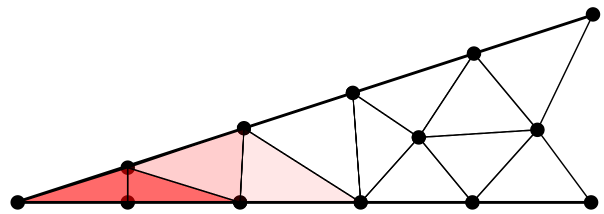


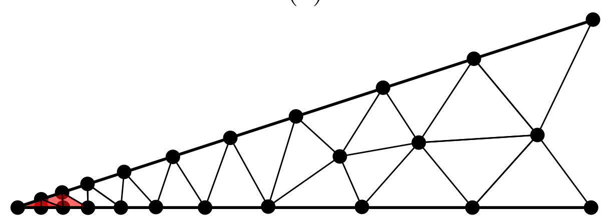
FIGURE 3.9 – Illustration de la recherche itérative de la distance minimale entre un cercle et un carré. La recherche débute en calculant la distance entre un sommet du carré et le sommet du cercle ($i = 1$) et se déplace progressivement vers la distance minimale située entre l'arête du cercle et l'arête gauche du carré ($i = 4$).

3.1.3.2 Critère d'insertion d'angle minimal

Afin de préserver la qualité des éléments du maillage, un critère d'insertion basé sur l'angle minimal entre deux faces doit être respecté. En effet, lorsque le/les angle(s) entre deux entités topologiques sont petits, cela génère des éléments de mauvaise qualité (Fig. 3.10a). Il est possible de raffiner le maillage localement afin de réduire la taille des éléments de mauvaise qualité, mais cela entraîne une augmentation importante du nombre d'éléments et ne règle pas le problème de mauvaise qualité. Cela le concentre seulement (Fig. 3.10b).



(a)



(b)

Figure 3.10 – Illustration de l'effet d'un angle faible sur la qualité des éléments de maillage (mauvaise qualité en rouge). a) Pour un écart nodal constant, b) Avec raffinement du maillage

Calcul de l'angle minimal entre deux faces

L'angle minimal $\theta_{min_{F_1,F_2}}$ entre deux faces F_1, F_2 est évalué itérativement à partir des vecteurs tangents $\underline{T}_{F_1}$, $\underline{T}_{F_2}$ aux deux faces évaluées en un point de l'arête qui relie les faces. La méthode d'évaluation de $\theta_{min_{F_1,F_2}}$ est décrite à l'algorithme 3.4 et illustrée à la figure 3.11.

Algorithme 3.4 : $\theta_{min}(F_1, F_2, Nb_{pas})$: Méthode de calcul de l'angle minimal entre deux faces

Données : Faces F_1, F_2, nombre de pas Nb_{pas}
Résultat : Angle minimal $\theta_{min_{F_1,F_2}}$

```
pour chaque Arête commune A_{F1,F2} à F1 et F2 faire
    Initialiser θ_{min_{F1,F2}} = π
    pour t = t_min à t_max pas (t_max − t_min)/Nb_pas faire
        Évaluer la position P(x, y, z) = A_{F1,F2}(t)
        Évaluer le vecteur tangent à l'arête T_{A_{F1,F2}} à t
        Évaluer les paramètres (u_{F1}, v_{F1}) de F1 à P(x, y, z)
        Calculer le vecteur normal N_{F1} de la face F1 à (u_{F1}, v_{F1})
        Évaluer le vecteur T_{F1} tangent à F1 et perpendiculaire à A_{F1,F2} :
            T_{F1} = T_{A_{F1,F2}} × N_{F1}
        Évaluer les paramètres (u_{F2}, v_{F2}) de F2 à P(x, y, z)
        Calculer le vecteur normal N_{F2} de la face F2 à (u_{F2}, v_{F2})
        Évaluer le vecteur T_{F2} tangent à F2 et perpendiculaire à A_{F1,F2} :
            T_{F2} = T_{A_{F1,F2}} × N_{F2}
        Calculer l'angle θ_{T_{F1},T_{F2}} entre T_{F1} et T_{F2}
        si θ_{T_{F1},T_{F2}} < θ_{min_{F1,F2}} alors
            θ_{min_{F1,F2}} = θ_{N_{F1},N_{F2}}
retourner Angle_{min_{F1,F2}}
```

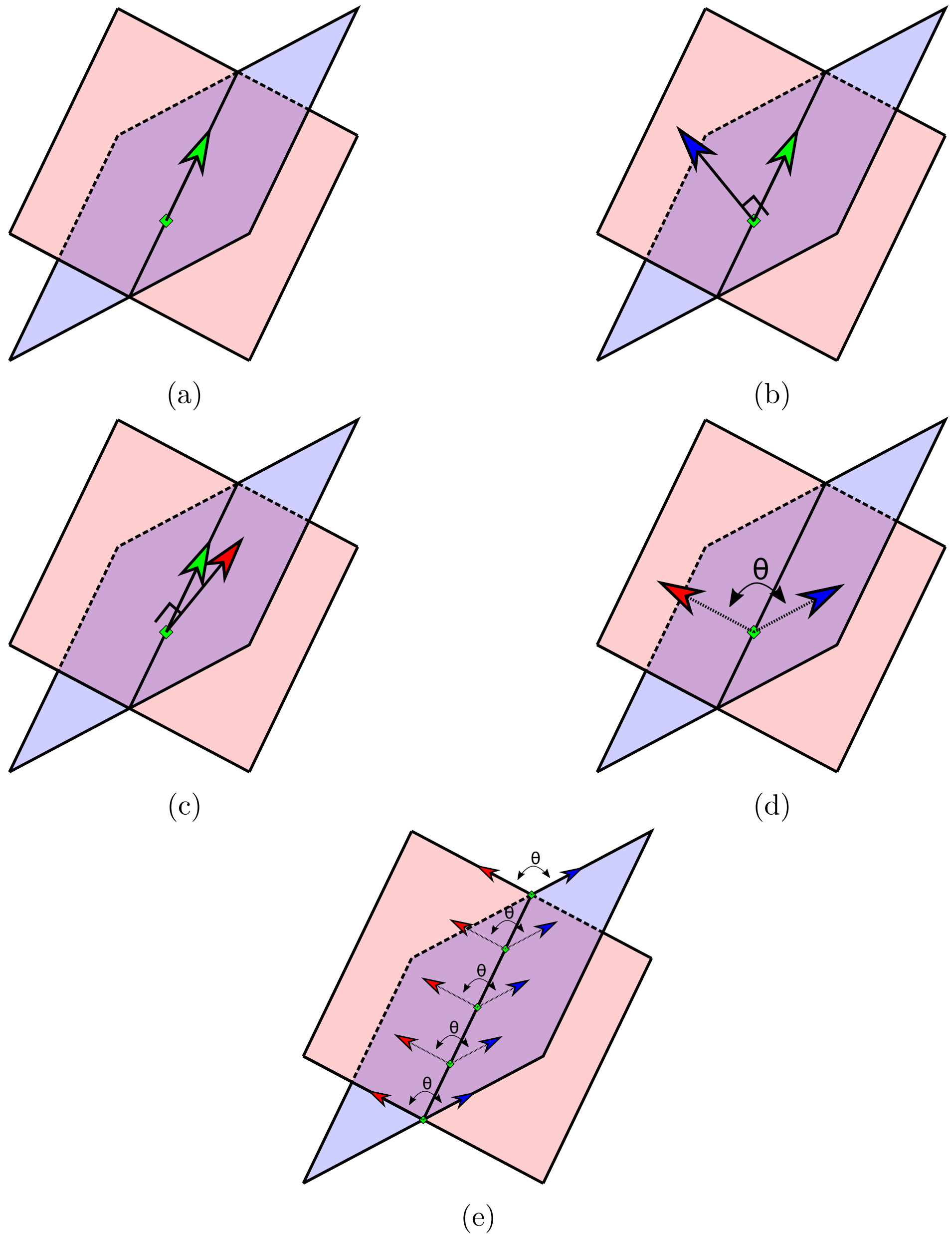


FIGURE 3.11 – Illustration de la méthode de calcul de l'angle minimal entre deux faces. a) Vecteur tangent à un point de l'arête. b) Vecteur normal à la face en bleu. c) Vecteur normal à la face en rouge. d) Angle entre les vecteurs tangents aux faces. e) Balayage de l'arête pour déterminer l'angle minimal entre les faces.

3.1.3.3 Critère de dimension minimale

Lors de la génération de l'insertion d'une particule qui intersecte le bord du VES, il peut arriver que les entités topologiques générées soient très petites. Afin d'éviter le raffinement excessif du maillage, des critères de volume minimal $Volume_{min}$, d'aire minimale $Aire_{min}$ et de longueur minimale $Longueur_{min}$ doivent être respectés. Ces dimensions minimales sont obtenues à l'aide des outils CAO. Ainsi, le volume d'une particule $\mathcal{P}$ défini par l'entité topologique volumique $V_{\mathcal{P}}$ doit être supérieur à $Volume_{min}$, l'aire des faces $F_{\mathcal{P}}$ supérieures à $Aire_{min}$ et chaque arête $A_{\mathcal{P}}$ plus longue que $Longueur_{min}$. Les opérations de calcul des dimensions à l'aide des outils CAO sont notées $Volume_{CAO}(V_{\mathcal{P}})$, $Aire_{CAO}(F_{\mathcal{P}})$, $Longueur_{CAO}(A_{\mathcal{P}})$.

3.1.3.4 Critère des fractions volumiques

La fraction volumique d'une ou d'un ensemble de particules est une donnée importante à respecter lors de la modélisation géométrique de la microstructure. Le critère de fraction volumique est respecté si la fraction volumique de particules est comprise entre la valeur de la fraction volumique cible $F_{vol_{cible}}$ plus ou moins un intervalle $\Delta F_{vol_{cible}}$. L'intervalle $\Delta F_{vol_{cible}}$ autorise une certaine variation dans la fraction volumique puisque qu'il est difficile et très souvent impossible d'atteindre la valeur exacte de $F_{vol_{cible}}$. Cet intervalle peut être fixé selon la variation de la fraction volumique observée expérimentalement.

3.1.3.5 Détail de l'algorithme d'insertion d'une particule

L'algorithme d'insertion du volume d'une particule $V_{\mathcal{P}}$ dans la microstructure M_{struct} consiste à vérifier si la géométrie de la microstructure respecte les critères de distance minimale, d'angle minimal, de dimensions minimales et de fraction volumique et si c'est le cas, d'effectuer les opérations géométriques nécessaires pour inclure la particule. L'algorithme 3.5 décrit la méthode d'insertion de particule $Insert(V_{\mathcal{P}}, M_{struct}, [...])$.

Algorithme 3.5 : $Insert(V_{\mathcal{P}}, M_{struct}, [...])$: Méthode d'insertion du volume d'une particule $V_{\mathcal{P}}$ dans le modèle géométrique de la microstructure M_{struct}

Données : Volume d'une particule $V_{\mathcal{P}}$, modèle géométrique de la microstructure M_{struct}, distance minimale $Dist_{min}$, angle minimal θ_{min}, volume minimal $Volume_{min}$, aire minimale $Aire_{min}$, longueur minimale $Longueur_{min}$, fraction volumique cible $F_{vol_{cible}}$, $\Delta F_{vol_{cible}}$, fraction volumique actuelle F_{vol}, grille de recherche d'entités topologiques G_{topo}

Résultat : Microstructure résultante $M_{struct_{\mathcal{P}}}$, fraction volumique F_{vol}

$L_{topo_{proxi}} = Proxi(G_{topo}, V_{\mathcal{P}}, Dist_{min})$
pour chaque $E_{topo} \in L_{topo_{proxi}}$ **faire**
  $Dist_{V_{\mathcal{P}},E_{topo}} = Dist_{CAO}(V_{\mathcal{P}}, E_{topo})$
  si $Dist_{V_{\mathcal{P}},E_{topo}} \leq Dist_{min}$ **alors retourner** $\varnothing$
si $V_{\mathcal{P}} \cap M_{struct} < V_{\mathcal{P}}$ **alors**
  $V_{\mathcal{P}} = V_{\mathcal{P}} \cap M_{struct}$
si $(F_{vol} + \frac{Volume_{CAO}(V_{\mathcal{P}})}{Volume_{VES}}) > (F_{vol_{cible}} + \Delta F_{vol_{cible}})$ **alors retourner** $\varnothing$
$M_{struct_{\mathcal{P}}} = Frag(V_{\mathcal{P}}, M_{struct})$
Nouvelles entités $E^*_{M_{struct_{\mathcal{P}}}}$ issues de $Frag(V_{\mathcal{P}}, M_{struct})$
pour chaque *Volume* $V_i \in E^*_{M_{struct_{\mathcal{P}}}}$ **faire**
  si $Volume_{CAO}(V_i) < Volume_{min}$ **alors retourner** $\varnothing$
pour chaque *Face* $F_i \in E^*_{M_{struct_{\mathcal{P}}}}$ **faire**
  si $Aire_{CAO}(F_i) < Aire_{min}$ **alors retourner** $\varnothing$
pour chaque *Arête* $A_i \in E^*_{M_{struct_{\mathcal{P}}}}$ **faire**
  si $Longueur_{CAO}(A_i) < Longueur_{min}$ **alors retourner** $\varnothing$
pour chaque *Face* $F_i \in E^*_{M_{struct_{\mathcal{P}}}}$ **faire**
  pour chaque *Face* $F_j \in E^*_{M_{struct_{\mathcal{P}}}}$ **faire**
    si $F_i \neq F_j$ **alors**
      si $Lien(F_i, F_j) =$ *Arête* **alors**
        si $\theta_{min}(F_i, F_j) < Angle_{min}$ **alors retourner** $\varnothing$
Ajouter $V_{\mathcal{P}}$ à G_{topo}
$F_{vol} = F_{vol} + \frac{Volume_{CAO}(V_{\mathcal{P}})}{Volume_{VES}}$
retourner $M_{struct_{\mathcal{P}}}$, F_{vol}

3.1.4 Algorithme RSA

La génération des microstructures à particules selon la méthode *«Random Sequential Adsorption»* (RSA) consiste à ajouter séquentiellement des particules dont les positions et orientations sont obtenues de façon aléatoire ou selon une distribution préétablie. La principale difficulté de la méthode RSA réside dans la détection du chevauchement entre une nouvelle particule et les particules déjà mises en place. Les outils CAO permettent de détecter efficacement si une nouvelle particule se situe à une distance inférieure à la distance minimale $Dist_{min}$ désirée.

3.1.4.1 Paramètres du générateur RSA

Comme mentionné dans la section (3.1.3) l'insertion d'une particule doit respecter certains critères. Ces critères d'insertion sont énumérés à la table 3.1.

Dans ce projet, les formes de particules choisies sont la sphère et le cylindre. La modélisation par les outils CAO permet d'avoir des particules de formes quelconques. La sphère et le cylindre sont des formes géométriques simples qui permettent de mettre en évidence les atouts de cette méthode.

La sphère est définie géométriquement par son diamètre Dia_{sph} et la position de son centre $P(x, y, z)_{sph}$. Le cylindre est défini géométriquement selon son diamètre Dia_{cyl}, sa longueur $Long_{cyl}$, position de son centre de masse $P(x, y, z)_{cyl}$ et son orientation $Ori(\phi, \theta)_{cyl}$. Le rapport de longueur du cylindre sur diamètre du cylindre est noté $Long_{cyl}/D_{cyl}$. Les paramètres géométriques $Para_{geo_{\mathcal{P}}}$ sont énumérés aux tables 3.2 et 3.3.

TABLE 3.2 – Paramètres géométriques $Geo_{\mathcal{P}}$ des particules sphériques

Nom	Paramètre	Distribution
Diamètre	Dia_{sph}	$\mathcal{X}_{Dia_{sph}}$
Position	$P(x, y, z)_{sph}$	$\mathcal{X}_{P(x,y,z)_{sph}}$

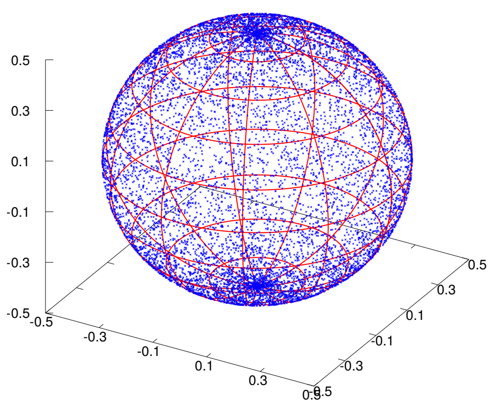
TABLE 3.3 – Paramètres géométriques $Geo_{\mathcal{P}}$ des particules cylindriques

Nom	Paramètre	Distribution
Diamètre	Dia_{cyl}	$\mathcal{X}_{Dia_{cyl}}$
Longueur	$Long_{cyl}$	$\mathcal{X}_{Long_{cyl}}$
Position	$P(x, y, z)_{cyl}$	$\mathcal{X}_{P(x,y,z)_{cyl}}$
Orientation	$Ori(\phi, \theta)_{cyl}$	$\mathcal{X}_{Ori(\phi,\theta)_{cyl}}$

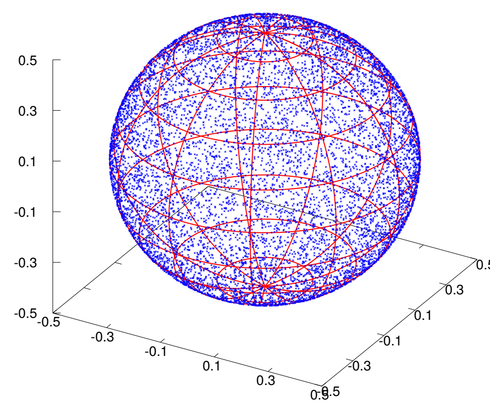
Ces paramètres géométriques peuvent, pour chaque particule, avoir les mêmes valeurs ou des valeurs aléatoires basées sur une distribution statistique.

Une attention particulière doit être portée sur la génération aléatoire des orientations des particules cylindriques. En effet, le tirage aléatoire des angles ϕ et θ du système de coordonnées sphériques doit être effectué de la façon appropriée afin d'obtenir par exemple une distribution aléatoire uniforme. Si le tirage aléatoire est effectué directement sur angles ϕ et θ, la distribution tend à se concentrer sur les pôles d'une sphère unitaire (Fig. 3.12a). Pour obtenir une distribution uniforme (Fig. 3.12b), il faut générer les angles de la façon suivante :

$$\begin{array}{lcl} r_1 & = & \text{Valeur aléatoire uniforme sur } [0,1] \\ r_2 & = & \text{Valeur aléatoire uniforme sur } [0,1] \\ \phi & = & 2\pi r_1 \\ \theta & = & \arccos(1-2r_2) \end{array} \tag{3.1}$$



(a)



(b)

FIGURE 3.12 – Illustration d'un tirage aléatoire de 10000 orientations (ϕ, θ) sur une sphère unitaire. a) Distribution non uniforme des points avec une concentration des points aux pôles. b) Distribution uniforme des points.

3.1.4.2 Détail de l'algorithme RSA

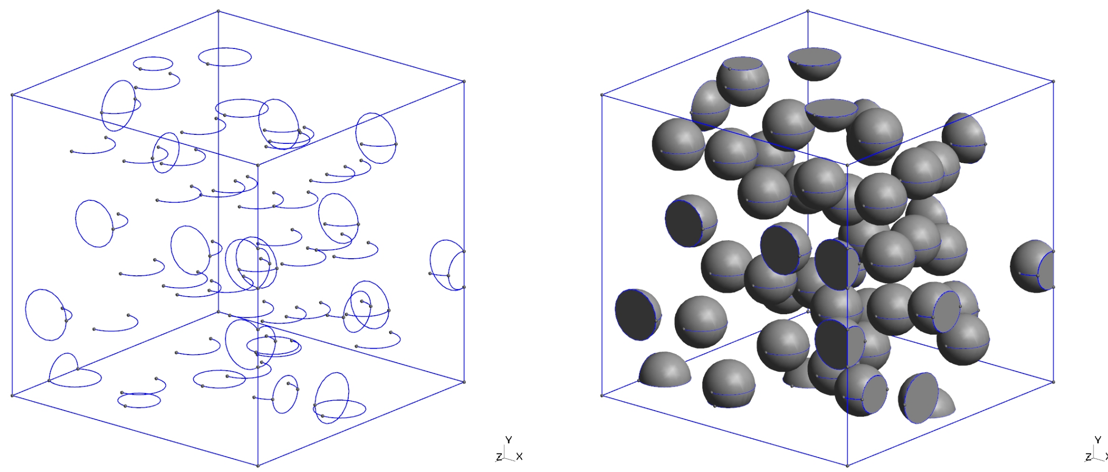
L'algorithme 3.6 résume le processus de génération d'une microstructure selon la méthode RSA. La première étape consiste à construire le domaine du VES noté M_{struct}. Dans le cadre de ce projet, la forme du VES est cubique unitaire. Un volume cubique unitaire est donc généré. Il est toutefois possible de générer des formes différentes pour modéliser, par exemple, des VES cylindriques. La seconde étape consiste à construire l'espace de voisinage (grille de recherche) des entités topologiques G_{topo}. Cette espace de voisinage permet la recherche rapide d'entités topologiques avoisinantes lors de l'insertion d'une nouvelle particule. La méthode RSA est l'étape suivante. L'algorithme va tenter d'insérer des particules tant que la fraction volumique de particules F_{vol} n'est pas proche de la fraction volumique cible $F_{vol_{cible}}$. La position $P(x, y, z)$ et l'orientation $Ori(\phi, \theta)$ d'une particule $\mathcal{P}$ sont générées selon des distributions statistiques $\mathcal{X}_{P(x,y,z)}$, $\mathcal{X}_{Ori(\phi,\theta)}$ (valeur fixe, distribution uniforme, distribution normale). Les paramètres géométriques $Geo_{\mathcal{P}}$ (tables 3.2 et 3.3), propres à la forme de la particule à modéliser, sont aussi obtenus selon des distributions statistiques $\mathcal{X}_{Geo_{\mathcal{P}}}$. À partir de la position, de l'orientation et des paramètres géométriques, le volume de la particule $V_{\mathcal{P}}$ est généré à l'aide des outils de la CAO. Si l'insertion $Insert(V_{\mathcal{P}}, M_{struct}, [...])$ de $V_{\mathcal{P}}$ respecte les critères d'insertion mentionnés plus haut, la microstructure est mise à jour et la nouvelle fraction volumique est calculée. La méthode prend fin lorsque la fraction volumique cible est atteinte selon la valeur de tolérance ΔF_{vol}).

Algorithme 3.6 : Méthode RSA

Construire le domaine du VES M_{struct} (cube unitaire)
Construire une grille de recherche d'entités topologiques G_{topo}
tant que $F_{vol} < (F_{vol_{cible}} - \Delta F_{vol})$ **faire**
    Générer la position $P(x, y, z)$ selon la distribution $\mathcal{X}_{P(x,y,z)}$
    Générer l'orientation $Ori(\phi, \theta)$ selon la distribution $\mathcal{X}_{Ori(\phi,\theta)}$
    Générer les paramètres géométriques $Geo_{\mathcal{P}}$ selon leurs distributions $\mathcal{X}_{Geo_{\mathcal{P}}}$
    Générer la particule $\mathcal{P}$ selon $P(x, y, z)$, $Ori(\phi, \theta)$ et $Geo_{\mathcal{P}}$
    $M^*_{struct_{\mathcal{P}}}, F_{vol}* = Insert(V_{\mathcal{P}}, M_{struct}, [...])$
    si $M^*_{struct_{\mathcal{P}}} \neq \varnothing$ **alors**
        $M_{struct} = M^*_{struct_{\mathcal{P}}}$
        $F_{vol} = F^*_{vol}$

3.1.4.3 Exemples de distributions obtenues par l'algorithme RSA

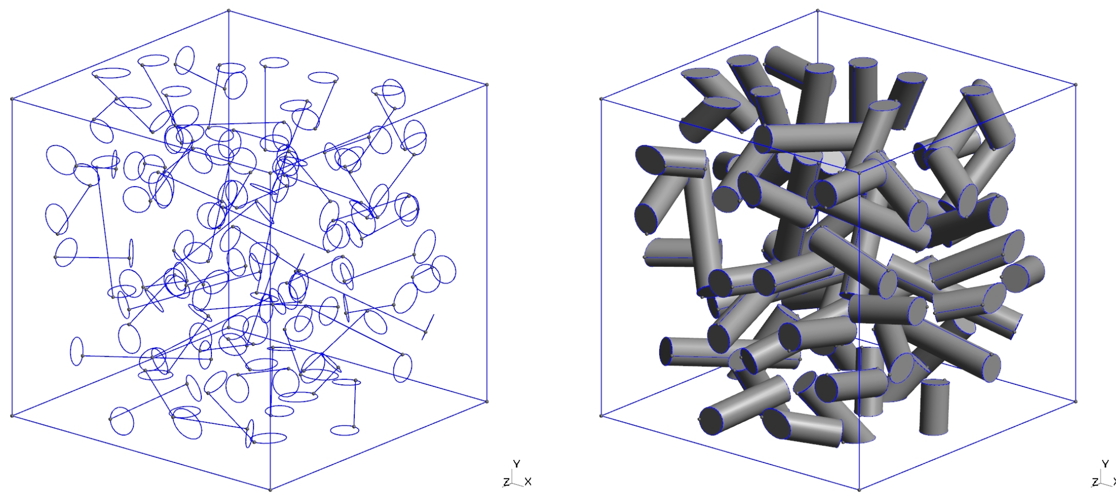
La figure 3.13 [1] illustre une distribution aléatoire de particules sphériques de même diamètre dans un cube unitaire selon une consigne de fraction volumique de 10%. La figure 3.14 illustre une distribution aléatoire de l'orientation et de la position de particules cylindriques de même diamètre et longueur dans un cube unitaire selon la même consigne de fraction volumique.



(a) (b)

Figure 3.13 – Illustration du modèle BREP d'une microstructure constituée de particules sphériques ($Dia = 1/6$) à une fraction volumique de 10%. a) Courbes et points. b) Surfaces des particules sphériques.

1. Visualisation réalisée à l'aide du logiciel GMSH [70]



(a) (b)

FIGURE 3.14 – Illustration du modèle BREP d'une microstructure constituée de particules cylindriques ($Dia = 0.085$, $L/D = 5$) à une fraction volumique de 10%. a) Courbes et points. b) Surfaces des particules cylindriques.

3.1.5 Algorithme basé sur la dynamique des corps rigides

La génération de la microstructure selon la dynamique des corps rigides (DCR) est une méthode de génération dite concurrente (section 2.2.1.2). Cette méthode utilise la simulation du mouvement et des collisions de corps rigides pour positionner un nombre de particules dans un espace de génération Ω_{gen} donné. Dans ce projet, la méthode de simulation de la DCR est de type *«time-driven»* c'est-à-dire que la simulation est gouvernée par la discrétisation du temps en pas de temps. La bibliothèque *Project Chrono* [39, 71] est utilisée pour accomplir la simulation de la DCR. Cette bibliothèque, open source, est simple d'utilisation.

La méthode de génération est divisée en trois étapes soit le remplissage du domaine de génération, l'élimination des chevauchements et la génération de la géométrie.

3.1.5.1 Remplissage du domaine de génération

Cette première étape consiste à remplir le domaine de génération Ω_{gen}. La position $P(x, y, z)$, l'orientation $Ori(\phi, \theta)$ et les paramètres géométriques $Geo_{\mathcal{P}}$ des particules sont générés aléatoirement, et ce, sans se soucier si les particules se chevauchent. Ces paramètres sont utilisés pour construire le maillage surfacique des particules. À cette étape, le maillage surfacique est utilisé plutôt que la représentation CAO puisqu'il permet de rapidement détecter et calculer les collisions entre les particules. Dans le cas présent, le maillage des particules sphériques et cylindriques est automatiquement généré par les outils de la bibliothèque *Project Chrono*. Il est toutefois possible de fournir le maillage surfacique d'une particule quelconque, maillage qui peut être obtenu par tesselation d'une forme géométrique issue de la représentation CAO. Afin d'assurer la distance minimale entre les particules $Dist_{min}$, les frontières des particules sont décalées vers l'extérieur d'une valeur de $\frac{1}{2}Dist_{min}$. Ainsi, si deux particules entrent en contact lors de la simulation, une distance de $\frac{1}{2}Dist_{min} + \frac{1}{2}Dist_{min}$ sera préservée une fois le modèle géométrique construit. Le domaine de génération Ω_{gen} est un cube de dimensions supérieures à celles du VES afin de réduire les effets de bord occasionnés lors du repositionnement des particules. Des frontières impénétrables définissent Ω_{gen} et empêchent les particules de sortir du domaine lors de la simulation. La méthode de remplissage de Ω_{gen} notée $Remplir(\Omega_{gen})$ suit l'algorithme 3.7 :

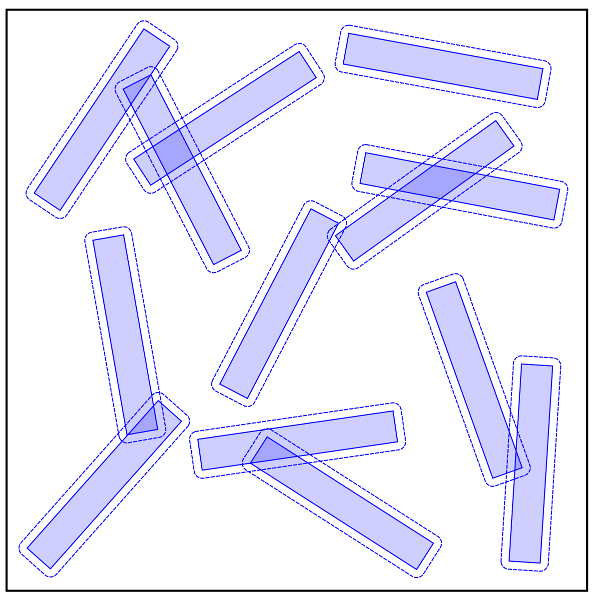


FIGURE 3.15 – Illustration du tirage aléatoire des frontières élargies des particules. Les particules sont représentées par les rectangles pleins. Les frontières élargies sont représentées par les traits pointillés.

3.1.5.2 Élimination des chevauchements

Le remplissage du domaine de génération étant complété, il faut maintenant éliminer les chevauchements (Fig. 3.16a). Cette étape est réalisée par la bibliothèque *Project Chrono*. L'approche utilisée ici consiste à imposer un vecteur de vitesse à toutes les

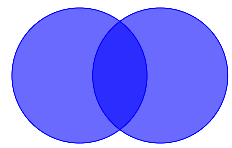
Algorithme 3.7 : *Remplir*(Ω_{gen}) : Méthode de remplissage de Ω_{gen}

Données : Domaine de génération Ω_{gen}, fraction volumique cible $F_{vol_{cible}}$, distribution de la position des particules $\mathcal{X}_{P(x,y,z)}$, distribution de l'orientation des particules $\mathcal{X}_{Ori(\phi,\theta)}$, distribution des paramètres géométrique des particules $\mathcal{X}_{Geo_{\mathcal{P}}}$, distance minimale entre particules $Dist_{min}$

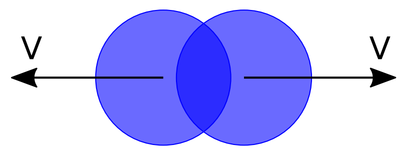
Résultat : Liste de particules tessellées $L_{\mathcal{T}_{\mathcal{P}}}$

Construire le domaine de génération Ω_{gen}
tant que $F_{vol} < F_{vol_{cible}}$ **faire**
    Générer la position $P(x, y, z)$ selon la distribution $\mathcal{X}_{P(x,y,z)}$
    Générer l'orientation $Ori(\phi, \theta)$ selon la distribution $\mathcal{X}_{Ori(\phi,\theta)}$
    Générer les paramètres géométriques $Geo_{\mathcal{P}}$ selon leurs distributions $\mathcal{X}_{Geo_{\mathcal{P}}}$
    Générer la particule $\mathcal{P}$ selon $P(x, y, z)$, $Ori(\phi, \theta)$ et $Geo_{\mathcal{P}}$
    Calculer $Vol_{\mathcal{P}}$ le volume de $\mathcal{P}$
    $F_{vol} = F_{vol} + \frac{Vol_{\mathcal{P}}}{Vol_{\Omega_{gen}}}$
    Générer la tesselation $\mathcal{T}_{\mathcal{P}}$ de $\mathcal{P}$
    Décaler vers l'extérieur $\mathcal{T}_{\mathcal{P}}$ d'une distance de $\frac{1}{2}Dist_{min}$
    Ajouter $\mathcal{T}_{\mathcal{P}}$ à $L_{\mathcal{T}_{\mathcal{P}}}$
retourner $L_{\mathcal{T}_{\mathcal{P}}}$

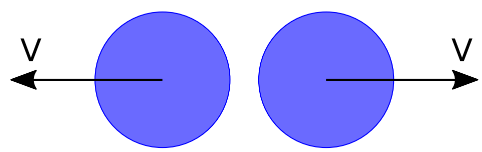
particules qui se chevauchent de façon à les séparer (Fig. 3.16b). Ce vecteur de vitesse est appliqué automatiquement par *Project Chrono* au centroïde de la particule et est orienté selon le chevauchement. Une fois les particules séparées, elles préservent leurs vitesses ce qui en fait un système de corps rigides en mouvement. Le modèle de collision choisi ici considère la transmission d'énergie comme étant parfaite. Ainsi, aucune perte d'énergie cinétique n'est occasionnée par les collisions. Cela fait en sorte d'éliminer tout effet de percolation qui pourrait survenir lorsque plusieurs particules entrent en collisions et demeurent liées les unes aux autres par perte d'énergie cinétique.



(a)



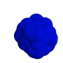
(b)



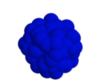
(c)

FIGURE 3.16 – Illustration du vecteur de vitesse imposé au centroïde des particules afin de les séparer. a) Chevauchement initial de deux particules. b) Application du vecteur de vitesse perpendiculaire au chevauchement. c) Particules séparées

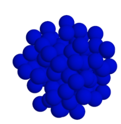
Une attention particulière doit être apportée au choix de la valeur du pas de temps Pas_{sim} de la simulation. En effet, un pas de temps trop grand pourrait faire en sorte que certaines collisions soient mal représentées en provoquant notamment des chevauchements additionnels. Inversement, un pas de temps trop petit allonge inutilement la durée de la simulation. Une fois tous les chevauchements éliminés, le système est progressivement ralenti afin d'atteindre un état de repos. La mise au repos des particules permet d'accélérer la simulation puisqu'une particule immobile nécessite beaucoup moins de calcul qu'une particule en mouvement. Lorsque toutes les particules sont au repos, le modèle géométrique peut être généré. Le modèle géométrique pourrait être généré une fois que tous les chevauchements sont éliminés, avec les particules encore en mouvement. Cependant, il peut arriver qu'un léger chevauchement apparaisse lorsque deux particules entrent en collision puisque la simulation est gouvernée par des pas de temps (approche de type *«time-driven*). Ce chevauchement occasionnerait une erreur de représentation géométrique. L'algorithme 3.8 détaille la méthode d'élimination des chevauchements par la dynamique des corps rigides noté $Simulation(L_{\mathcal{T}_\mathcal{P}})$. La figure 3.17 illustre un exemple d'une simulation réalisée avec 100 sphères entassées à un même endroit.



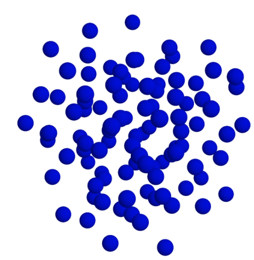
(a) $t_{sim} = 0$



(b) $t_{sim} = 10$



(c) $t_{sim} = 20$



(d) $t_{sim} = 50$

FIGURE 3.17 – Simulation de 100 sphères. a) Entassement des sphères. b-c) Élimination des chevauchements. d) Positions finales des sphères

Algorithme 3.8 : *Simulation*$(L_{\mathcal{T}_\mathcal{P}})$: Méthode d'élimination des chevauchements des particules par la simulation de la dynamique des corps rigides

Données : Liste de particules tessellées $L_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}$, pas de temps de la simulation Pas_{sim}, durée maximale de la simulation $t_{sim_{max}}$, facteur de réduction de vitesse $\alpha_{vitesse}$, seuil de vitesse linéaire minimale V_{min}, seuil de vitesse angulaire minimale ω_{min}

Résultat : Liste de particules tessellées $L_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}$

Lister les particules qui se chevauchent $L^C_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}$
tant que $L^C_{\mathcal{T}_\mathcal{P}} \neq \varnothing$ ***et*** $t_{sim} < t_{sim_{max}}$ **faire**
  pour chaque $\mathcal{T}_\mathcal{P} \in L_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}$ **faire**
    si $\mathcal{T}_\mathcal{P} \in L^C_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}$ **alors**
      Appliquer un vecteur de vitesse $\underline{V}_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}$ au centroïde de $\mathcal{T}_\mathcal{P}$ perpendiculaire à la zone de chevauchement
    sinon
      $\underline{V}_{\mathcal{T}_\mathcal{P}} = \alpha_{vitesse}\underline{V}_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}$
      $\underline{\omega}_{\mathcal{T}_\mathcal{P}} = \alpha_{vitesse}\underline{\omega}_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}$
      si $\left|\underline{V}_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}\right| < V_{min}$ **alors** $\underline{V}_{\mathcal{T}_\mathcal{P}} = \underline{0}$
      si $\left|\underline{\omega}_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}\right| < \omega_{min}$ **alors** $\underline{\omega}_{\mathcal{T}_\mathcal{P}} = \underline{0}$
  $t_{sim} = t_{sim} + Pas_{sim}$
  Mettre à jour $L^C_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}$
si $L^C_{\mathcal{T}_\mathcal{P}} \neq \varnothing$ ***ou*** $\underline{V}_{\mathcal{T}_\mathcal{P}} \neq \underline{0}$ ***ou*** $\underline{\omega}_{\mathcal{T}_\mathcal{P}} \neq \underline{0}$ **alors retourner** $\varnothing$
retourner $L_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}$

3.1.5.3 Génération de la géométrie

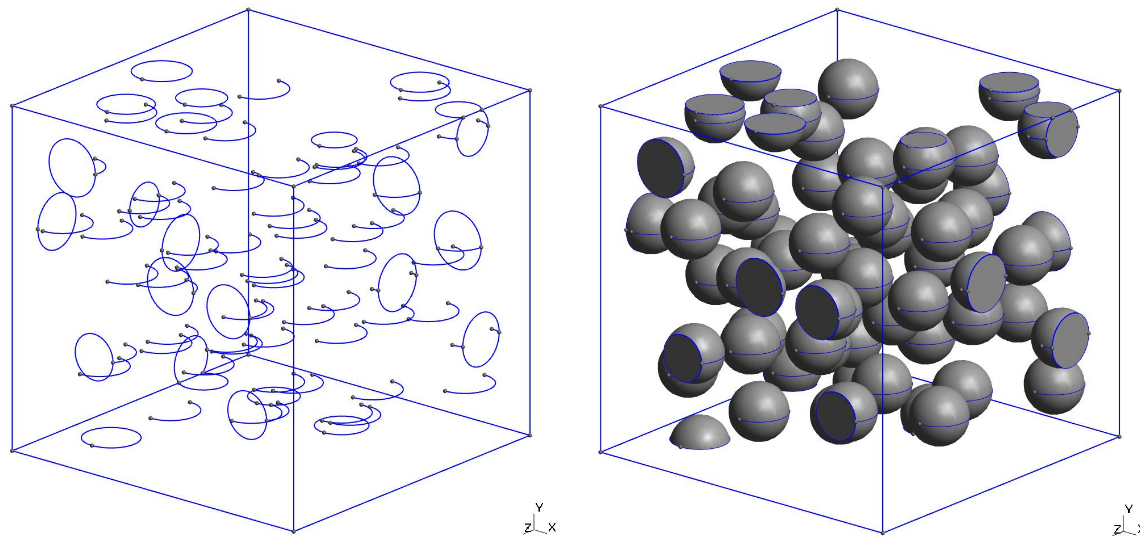
Une fois la simulation de la dynamique de corps rigides complétée, c'est-à-dire lorsque toutes les particules sont immobiles, la géométrie de la microstructure peut être générée. La méthode de génération de la géométrie suit l'algorithme 3.9. Comme mentionné au début de cette section, l'insertion d'une particule doit respecter certains critères énumérés à la table 3.1. Ces critères font en sorte que certaines particules positionnées par la simulation DCR pourraient ne pas être insérées. Ces échecs d'insertion sont pour la plupart occasionnés par la distance minimale $Dist_{min}$ non respectée entre une particule et le bord du VES et l'angle minimal θ_{min} entre deux faces. Le domaine de génération Ω_{gen} est défini plus grand que le domaine du VES Ω_{VES} afin d'éviter les effets de bord. Se faisant, une particule peut se retrouver à proximité du bord du VES même si sa frontière tessellée fut décalée. Contrairement à la méthode RSA, une particule qui ne peut être insérée n'est pas remplacée par une nouvelle particule générée aléatoirement. Afin de compenser le manque de particules aux bords du VES, une méthode d'érosion est employée afin d'exclure les résultats aux bords. Cette méthode est présentée à la section 3.5.

Algorithme 3.9 : Méthode DCR

Construire le domaine de génération Ω_{gen}
$L_{\mathcal{T}_\mathcal{P}} = Remlir(\Omega_{gen})$
$L^*_{\mathcal{T}_\mathcal{P}} = Simulation(L_{\mathcal{T}_\mathcal{P}})$
si $L^*_{\mathcal{T}_\mathcal{P}} == \varnothing$ **alors retourner** $\varnothing$
Construire le domaine du VES M_{struct} (cube unitaire)
Construire une grille de recherche d'entités topologiques G_{topo}
pour chaque $\mathcal{T}_\mathcal{P} \in L^*_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}$ **faire**
    Obtenir la position $P(x,y,z)_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}$ de $\mathcal{T}_\mathcal{P}$
    Obtenir l'orientation $Ori(\phi,\theta)_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}$ de $\mathcal{T}_\mathcal{P}$
    Obtenir les paramètres géométriques $Geo_\mathcal{P}$ de $\mathcal{T}_\mathcal{P}$
    Générer la particule $\mathcal{P}$ selon $P(x,y,z)_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}$, $Ori(\phi,\theta)_{\mathcal{T}_\mathcal{P}}$ et $Geo_\mathcal{P}$
    $M^*_{struct_\mathcal{P}}, F_{vol}* = Insert(V_\mathcal{P}, M_{struct}, [...])$
    si $M^*_{struct_\mathcal{P}} \neq \varnothing$ **alors**
        $M_{struct} = M^*_{struct_\mathcal{P}}$
        $F_{vol} = F^*_{vol}$

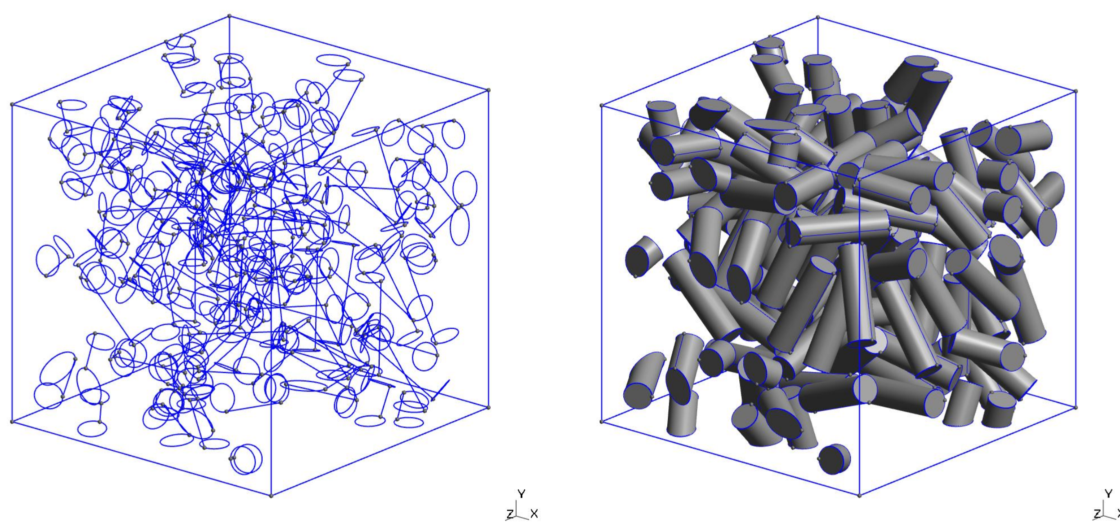
3.1.5.4 Exemples de distributions obtenues par l'algorithme DCR

La figure 3.18 illustre une distribution aléatoire de particules sphériques de même diamètre dans un cube unitaire selon une consigne de fraction volumique de 20%. La figure 3.19 illustre une distribution aléatoire de l'orientation et de la position de particules cylindriques de même diamètre et longueur dans un cube unitaire selon la même consigne de fraction volumique.



(a) (b)

Figure 3.18 – Illustration du modèle BREP d'une microstructure constituée de particules sphériques ($Dia = 1/6$) selon la fraction volumique cible de 20%. a) Courbes et points. b) Surfaces des particules sphériques.



(a) (b)

Figure 3.19 – Illustration du modèle BREP d'une microstructure constituée de particules cylindriques ($Dia = 0.085$, $L/D = 5$) selon la fraction volumique cible de 20%. a) Courbes et points. b) Surfaces des particules cylindriques.

3.1.6 Analyse du modèle géométrique

Le modèle géométrique d'un VES est analysé selon la fraction volumique des constituants (section 3.1.6.1), le centre de masse et les moments quadratiques des particules (section 3.1.6.2) et le tenseur d'orientation des particules élancées (section 3.1.6.3).

3.1.6.1 Fraction volumique des constituants

La fraction volumique d'un constituant $f_{vol_{\mathcal{C}_i}}$ est calculée en divisant le volume de $\mathcal{C}_i$ par le volume initial du VES $V_{ini_{VES}}$ qui est dans ce cas-ci le volume d'un cube unitaire (Eq. 3.2). La fraction volumique n'est pas évaluée par rapport au total du volume des constituants (particules et matrice), car si un constituant est considéré comme étant du vide (porosité) le calcul serait faussé.

$$f_{vol_{\mathcal{C}_i}} = \frac{V_{\mathcal{C}_i}}{V_{ini_{VES}}} \tag{3.2}$$

Lors de la génération de M_{struct}, chaque volume V d'un constituant est répertorié dans une liste $L_{V_{\mathcal{C}_i}}$ correspondant a un $\mathcal{C}_i$. L'évaluation du volume total d'un constituant $V_{\mathcal{C}_i}$ par sa représentation géométrique consiste à faire la somme du volume de chaque entité topologique volumique de $L_{V_{\mathcal{C}_i}}$. Le volume d'une entité topologique volumique est calculé à l'aide des outils de la CAO.

3.1.6.2 Centre de masse et moments quadratiques

Le centre de masse et les moments quadratiques des particules par rapport aux axes du repère global sont évalués afin de déterminer si les particules d'une microstructure sont uniformément positionnées. Ces deux indicateurs sont calculés à l'aide des outils de la CAO. La masse volumique des particules est fixée à une valeur de 1.0. Le centre de masse d'une distribution de particules parfaitement isotrope dans un cube unitaire dont un coin est l'origine à la forme suivante :

Table 3.4 – Centre de masse d'une distribution de particules parfaitement isotrope

Centre de masse	
x	0.5
y	0.5
z	0.5

3.1.6.3 Tenseur d'orientation

Le tenseur d'orientation est un outil mathématique qui permet de décrire l'état d'orientation global d'un groupe de vecteurs unitaires. L'utilisation de cet outil est pertinente lorsqu'une microstructure est composée de particules élancées dont le volume est principalement réparti autour d'un axe.

L'orientation d'une particule est représentée par le vecteur unitaire $\underline{p}$ parallèle à l'axe principal de la particule. Ce vecteur est calculé à partir des angles ϕ et θ du repère sphérique (Fig. 3.6) comme suit :

$$\underline{p} = \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ p_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin\theta\cos\phi \\ \sin\theta\sin\phi \\ \cos\theta \end{bmatrix} \tag{3.3}$$

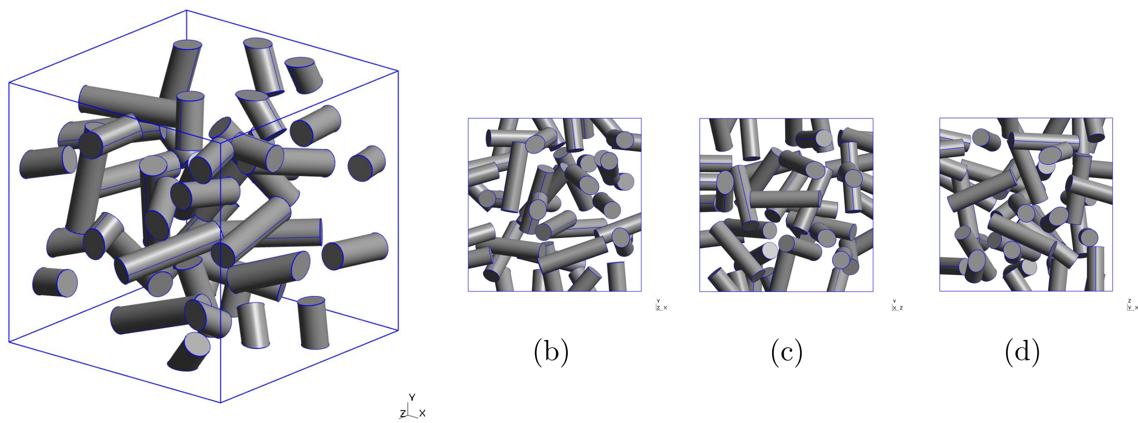
Le tenseur d'orientation du deuxième ordre est calculé selon l'équation 3.4. Une description complète du développement du tenseur d'orientation est fournie par [72].

$$\underline{\underline{a}}_2 = \langle \underline{p} \otimes \underline{p} \rangle = \begin{bmatrix} p_x p_x & p_x p_y & p_x p_z \\ p_y p_x & p_y p_y & p_y p_z \\ p_z p_x & p_z p_y & p_z p_z \end{bmatrix} \tag{3.4}$$

Tenseur d'orientation isotrope

Le tenseur d'orientation d'un groupe de particules parfaitement orientées aléatoirement est représenté à l'équation 3.5. La figure 3.20 illustre une microstructure dont les particules de forme cylindrique sont orientées aléatoirement.

$$\underline{\underline{a}}_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix} = \frac{1}{3}\underline{\underline{\delta}} \tag{3.5}$$



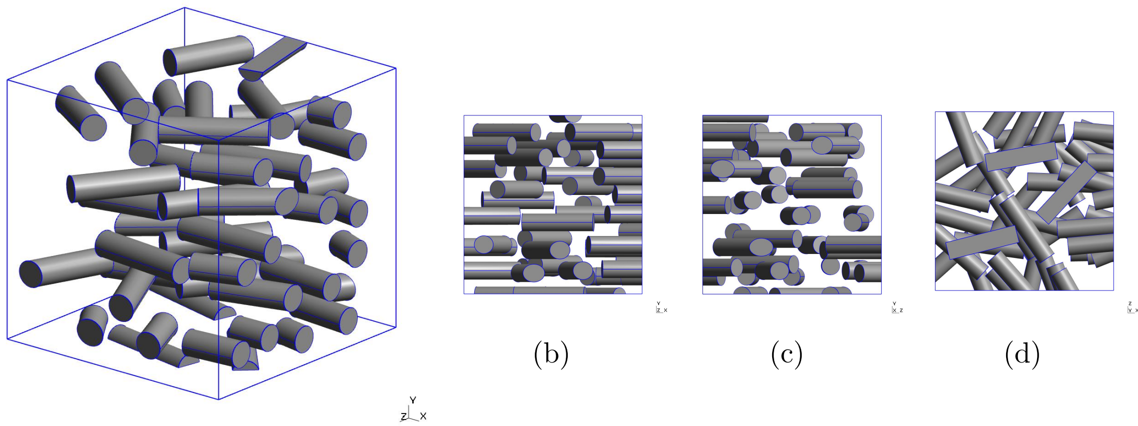
(a) (b) (c) (d)

FIGURE 3.20 – Illustration d'une microstructure aux particules cylindriques orientées aléatoirement. a) Vue d'ensemble. b) Plan xy. c) Plan yz. d) Plan xz.

Tenseur d'orientation orthotrope (isotrope planaire)

Le tenseur d'orientation est représenté à l'équation 3.6. La figure 3.21 illustre une microstructure dont les particules de forme cylindrique sont orientées aléatoirement seulement dans le plan xz.

$$\underline{\underline{a}}_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\left(\underline{\underline{\delta}} - \underline{y} \otimes \underline{y}\right) \tag{3.6}$$



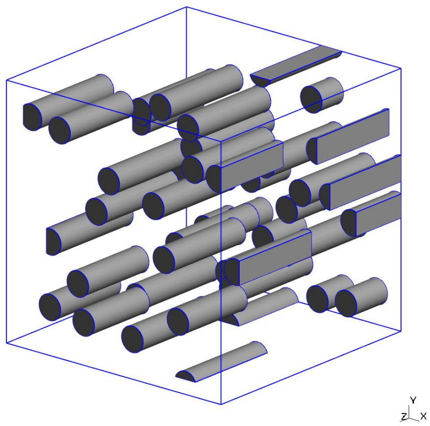
(a) (b) (c) (d)

FIGURE 3.21 – Illustration d'une orientation orthotrope ou les particules sont orientées aléatoirement selon le plan xz. a) Vue d'ensemble. b) Plan xy. c) Plan yz. d) Plan xz.

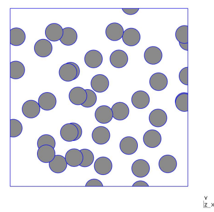
Tenseur d'orientation orthotrope (unidirectionnel)

Le tenseur d'orientation est représenté à l'équation 3.7. La figure 3.22 illustre une microstructure dont les particules de forme cylindrique sont orientées uniquement selon l'axe z.

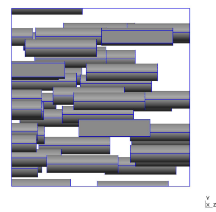
$$\underline{\underline{a}}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \underline{z} \otimes \underline{z} \tag{3.7}$$



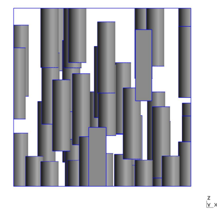
(a)



(b)



(c)



(d)

FIGURE 3.22 – Illustration d'une orientation orthotrope ou les particules sont parfaitement alignées selon l'axe z. a) Vue d'ensemble. b) Plan xy. c) Plan yz. d) Plan xz.

3.2 Génération de la carte de taille

La carte de taille $\mathcal{M}_t$ définit l'écart nodal à respecter en tout point du domaine du modèle géométrique. Dans le cas présent, le modèle géométrique représente la microstructure du matériau étudié. Si le modèle géométrique est discrétisé seulement selon une consigne d'écart nodal constant, des éléments aplatis de mauvaise qualité peuvent être générés à certains endroits où la distance entre deux éléments topologiques $Dist_{topo_1,topo_2}$ est faible. Le mailleur pourrait aussi ne pas converger. Si la consigne d'écart nodal constant est fixée selon $Dist_{topo_1,topo_2}$ minimale du modèle, le maillage résultant comportera beaucoup d'éléments. La carte de taille permet donc au mailleur de construire des éléments plus petits aux endroits où c'est nécessaire et des éléments plus grossiers où le modèle le permet.

3.2.1 Création de la carte de taille

La carte de taille est représentée par un champ de scalaire $\mathcal{M}_t(x, y, z)$. Elle est exprimée par une grille régulière $\mathcal{T}$ de n_x, n_y, n_z éléments hexaédriques K couvrant entièrement la microstructure M_{struct}. D'abord, la boîte englobante de la microstructure $B_{M_{struct}}$ est obtenue à partir de la sommation des boîtes englobantes des entités topologiques de M_{struct}. $B_{M_{struct}}$ est utilisée pour définir les dimensions de la carte de taille. Cette boîte est agrandie de chaque côté par un facteur de 1.1 de sorte que la carte enveloppe la microstructure en laissant une marge. Cette marge permet au mailleur de toujours avoir de l'information sur l'écart nodal même si celui-ci est légèrement hors des dimensions de la microstructure. Une grille régulière de n_x, n_y, n_z éléments hexaédriques est générée suivant les dimensions de la boîte englobante. La figure 3.23 illustre la grille de la carte de taille d'une microstructure à particules cylindriques.

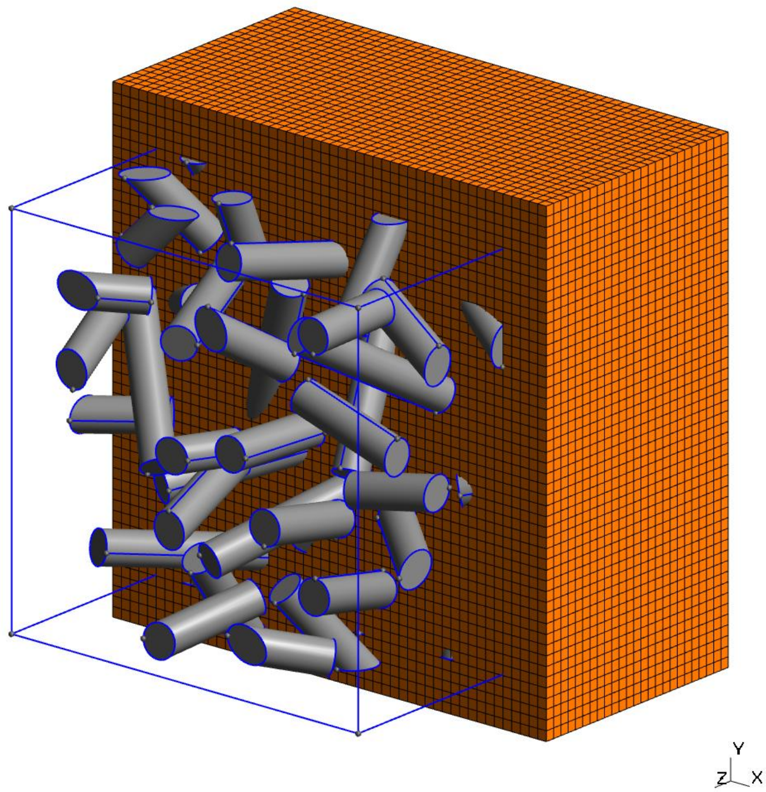


FIGURE 3.23 – Illustration de la grille régulière de $50 \times 50 \times 50$ éléments hexaédriques formant la carte de taille.

3.2.2 Paramètres de génération de la carte

L'un des premiers paramètres à considérer est l'écart nodal global E_n du modèle. Ce paramètre correspond à l'écart nodal à respecter si aucun autre paramètre n'entre en jeu c'est-à-dire en dehors des zones de raffinement. En d'autres termes, c'est la valeur par défaut de l'écart nodal. Initialement, l'écart nodal E_K attribué à chaque hexaèdre K de $\mathcal{T}$ à est égal à E_n.

$$\forall K \in \mathcal{T} \quad E_K = E_n \tag{3.8}$$

Le deuxième paramètre est le nombre de couches d'éléments de maillage minimum entre deux entités topologiques noté $Nb_{ele_{min}}$. Ce paramètre permet de raffiner localement le maillage si la distance $Dist(Pos_i, Pos_j)$ entre deux positions Pos_i et Pos_j respectivement sur les entités topologiques E_{topo_i} et E_{topo_j} est inférieure à $Nb_{ele_{min}}$ multiplié par E_n. L'écart nodal local E_{loc} en fonction de $Nb_{ele_{min}}$, $Dist_{Pos_i,Pos_j}$ est calculé comme suit :

$$E_{loc} = \frac{Dist_{Pos_i,Pos_j}}{Nb_{ele_{min}}} \tag{3.9}$$

Le troisième paramètre de la génération de la carte de taille est l'écart nodal à l'interface des particules noté E_{inter}. Ce paramètre est utilisé pour raffiner le maillage aux interfaces particules/matrice afin d'avoir une meilleure définition des champs aux interfaces. E_{inter} peut, par exemple, être fixé à une valeur plus élevée que E_n si les dimensions des particules sont petites par rapport à E_n. La valeur de E_K a prédominance sur E_{inter} si elle est plus petite. Ainsi, si la valeur de E_K est déjà plus petite que celle de E_{inter}, la valeur de E_K restera inchangée. Si la valeur de E_{inter} est plus petite que la valeur de E_K, la valeur de E_K sera égale à E_{inter}.

Le dernier paramètre de la carte est le facteur d'augmentation de l'écart nodal noté f_E. Puisque la consigne de taille n'est pas la même d'un endroit à l'autre, et qu'un saut brusque de taille engendre des éléments de mauvaise qualité et la non convergence du mailleur, il faut faire varier progressivement la consigne de taille. La valeur de f_E est habituellement autour de 1.25.

3.2.3 Algorithme d'échantillonnage

La génération de la carte de taille repose sur un algorithme d'échantillonnage qui permet d'attribuer une valeur d'écart nodal local E_{loc} à chaque hexaèdre K de la grille régulière $\mathcal{T}$. L'algorithme va déterminer pour chaque hexaèdre si E_{loc} doit être ajusté à la baisse, si $Nb_{ele_{min}}$ ou E_{inter} n'est pas respecté ou si E_{loc} doit prendre la valeur globale E_n du modèle.

3.2.3.1 Raffinement pour $Nb_{ele_{min}}$

Le respect du nombre d'éléments minimal entre deux entités topologiques est vérifié pour chaque hexaèdre K de la grille $\mathcal{T}$. Une grille de recherche d'entités topologique G_{topo} est utilisée pour repérer les entités topologiques à proximité les uns les autres. Deux entités topologiques (E_{topo_1}, E_{topo_2}) sont considérées à proximité si la distance minimale les séparant est inférieure à $Nb_{ele_{min}}E_n$. Si deux entités topologiques sont à proximité, un balayage paramétrique sera effectué sur l'entité topologique de dimension topologique supérieure afin d'évaluer différentes positions Pos_i sur E_{sup}. À l'aide des outils de la CAO, la position Pos_j, sur l'entité topologique de dimension topologique inférieure E_{inf}, la plus près de Pos_i est calculée. Si la distance entre ces deux positions $Dist_{Pos_i,Pos_j}$ est inférieure à $Nb_{ele_{min}} \cdot E_n$, une liste des hexaèdres L_K traversés par la droite reliant Pos_i et Pos_j est créée. La valeur de l'écart nodal de chaque hexaèdre K_i

de L_K est modifiée selon l'équation 3.9. La figure 3.25 illustre le processus de raffinement de la carte de taille.

3.2.3.2 Raffinement aux interfaces particules/matrice

Le raffinement de la carte de taille aux interfaces particules/matrice est effectué pour chaque hexaèdre K de la grille $\mathcal{T}$ traversé par les faces des particules si l'écart nodal à l'interface E_{inter} est plus petit que l'écart nodal global E_n du modèle.

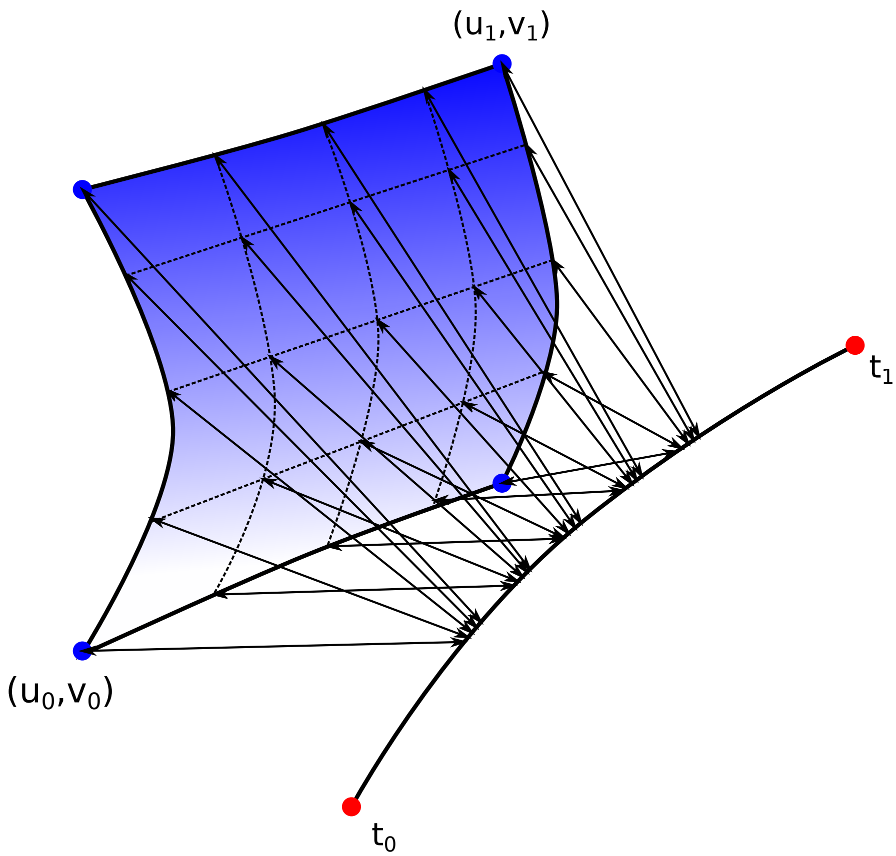
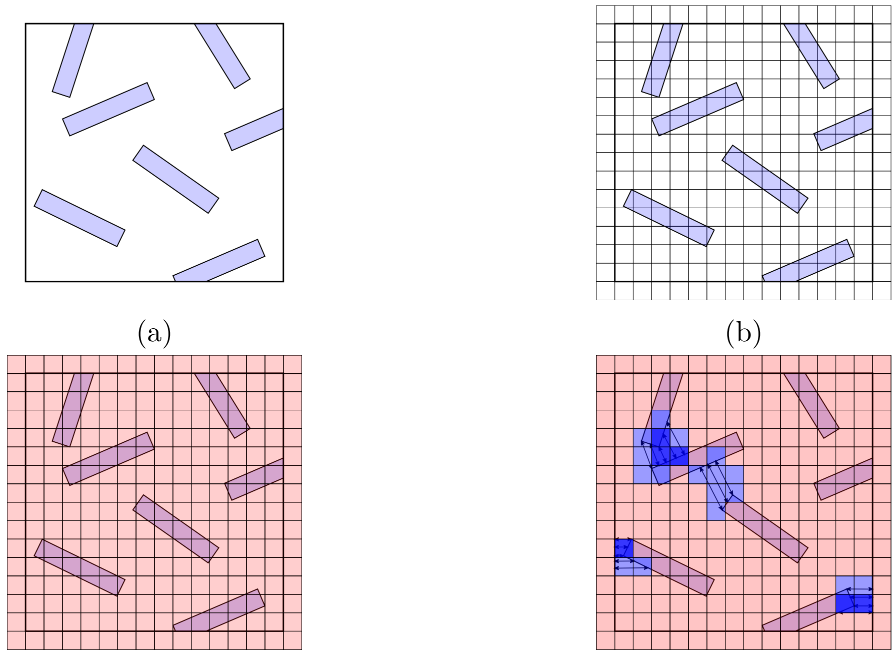


FIGURE 3.24 – Illustration d'un exemple du balayage paramétrique entre une face et une arête selon $Nb_{pas} = 5$. Les flèches représentent la distance minimale entre les positions $Pos(u_i, v_j)$ et la position $Pos(t)$ sur l'arête la plus proche.



(a) (b) (c) (d)

FIGURE 3.25 – Illustration du processus de raffinement de la carte de taille. a) Microstructure M_{struct}. b) Grille de hexaèdre $\mathcal{T}$ $(n_x = n_y = 16)$. c) Initialisation de la carte avec E_n. d) Raffinement par balayage des entités à proximité.

3.2.3.3 Détail de l'algorithme d'échantillonnage

L'algorithme de l'échantillonnage de la carte de taille en fonction du nombre d'éléments minimums entre deux entités topologiques et de l'écart nodal aux interfaces particules/matrice E_{inter} est présenté à l'algorithme 3.10. Pour chaque entité topologique de la microstructure, une détection de proximité est effectuée afin d'évaluer si une autre entité est proche. La distance minimale entre deux entités proches est calculée à l'aide des outils de CAO. Si cette distance est inférieure au nombre de couches d'éléments minimum, la carte de taille est raffinée à l'aide d'un balayage paramétrique de l'entité topologique de dimension topologique supérieure. Pour chaque point du balayage paramétrique, la distance minimale avec l'autre entité topologique est calculée. La valeur de l'écart nodal de tous les hexaèdres traversés par la droite entre ces deux points formant la distance minimale est réactualisée afin de satisfaire le nombre minimum de couches d'éléments.

Algorithme 3.10 : $Raffinement\,(\mathcal{M}_t, M_{struct}, E_n, Nb_{ele_{min}}, E_{inter})$: Méthode de raffinement de la carte de taille

Données : Carte de taille $\mathcal{M}_t$, Microstructure M_{struct}, Écart nodal global E_n, Nombre d'éléments minimums entre deux entités topologiques $Nb_{ele_{min}}$, Écart nodal à l'interface des particules E_{inter}

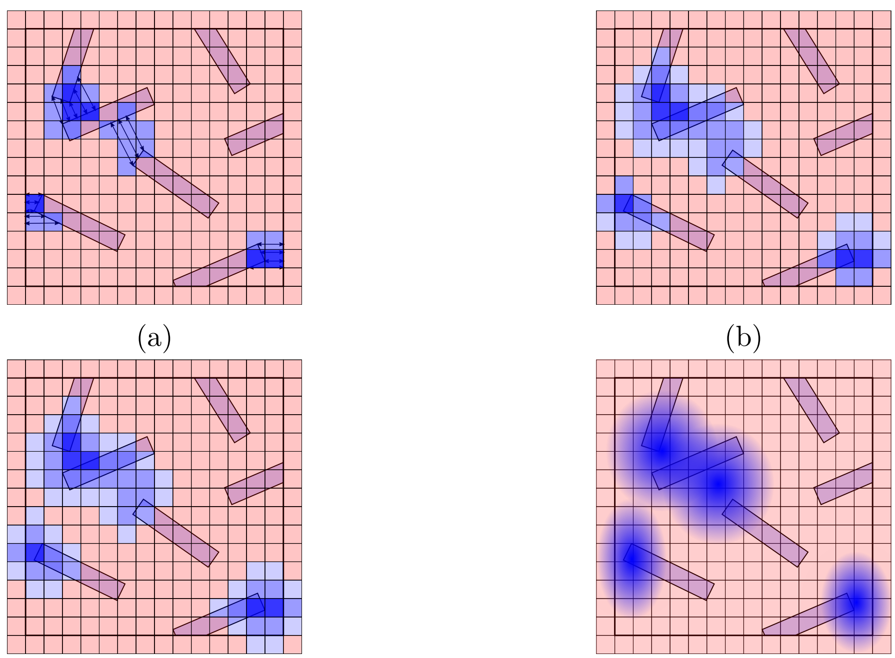
Résultat : Carte de taille raffinée $\mathcal{M}_t$

Création d'une grille de recherche d'entité topologique G_{topo}
Remplir G_{topo} avec M_{struct}
pour chaque $E_i \in G_{topo}$ **faire**
    $L_{topo_{proxi}} = Proxi(G_{topo}, E_i, Nb_{ele_{min}} \cdot E_n)$
    pour chaque $E_j \in L_{topo_{proxi}}$ **faire**
        si $E_i == E_j$ *ou* $Lien(E_i, E_j) \neq \varnothing$ **alors suivant**
        si $Dist_{CAO_{E_i,E_j}} \geq Nb_{ele_{min}} \cdot E_n$ **alors suivant**
        Dimensions topologiques D_i de E_i et D_j de E_j
        si $D_i \geq D_j$ **alors** $E_{sup} = E_i$ et $E_{inf} = E_j$
        sinon $E_{sup} = E_j$ et $E_{inf} = E_i$
        pour Pos_i *sur* E_{sup} *par balayage paramétrique (arête, face) selon* Nb_{pas} *ou sur le sommet* **faire**
            Évaluer par la CAO la position Pos_j sur E_{inf} la plus proche de Pos_i
            Lister les hexaèdres K traversés par le vecteur $\underline{Pos_i, Pos_j}$ dans L_K
            $Dist_{Pos_i,Pos_j} = \left\| \underline{Pos_i, Pos_j} \right\|$
            $E_{loc} = \frac{Dist_{Pos_i,Pos_j}}{Nb_{ele_{min}}}$
            pour chaque $K_i \in L_K$ **faire**
                si $E_{loc} < E_{K_i}$ **alors** $E_{K_i} = E_{loc}$
si $E_{inter} < E_n$ **alors**
    pour chaque *Face* $F_i \in M_{struct}$ **faire**
        Lister les hexaèdres K traversés par F_i dans $L_{K_{inter}}$
        pour chaque $K_i \in L_{K_{inter}}$ **faire**
            si $E_{inter} < E_{K_i}$ **alors** $E_{K_i} = E_{inter}$
retourner $\mathcal{M}_t$

3.2.4 Algorithme de lissage de la carte

Le lissage de la carte de taille est effectué en partant des hexaèdres dont l'écart nodal est le plus petit et en modifiant les hexaèdres voisins selon le facteur d'augmentation

f_E. Une fois la carte lissée, les résultats aux hexaèdres sont extrapolés aux nœuds de façon à interpoler l'écart nodal. La figure 3.26 illustre le processus de lissage de la carte de taille. La méthode de lissage est détaillée à l'algorithme 3.11. L'algorithme de lissage débute par la création d'une liste ordonnée croissante des hexaèdres de la carte ordonnée selon leur valeur d'écart nodal. Le premier élément de la liste est retiré et ses éléments voisins sont identifiés. Si la valeur de l'écart nodal d'un élément voisin est plus grand que l'élément de la liste, cette valeur est remplacée par celle de l'élément de la liste et augmentée du facteur d'augmentation. L'élément voisin est ajouté à la liste ordonnée. Cette séquence d'opération est effectuée tant qu'il reste des éléments dans la liste. Finalement, l'extrapolation aux nœuds est effectuée en calculant la moyenne des écarts nodaux des éléments hexaédriques connectés au nœud.



(a) (b) (c) (d)

Figure 3.26 – Illustration du processus de lissage de la carte de taille. a) Résultat du raffinement. b-c) Lissage. d) Extrapolation des résultats aux nœuds.

Algorithme 3.11 : *Lissage* $(\mathcal{M}_t, E_n, f_E)$: Méthode de lissage de la carte de taille

Données : Carte de taille $\mathcal{M}_t$, Écart nodal global E_n, Facteur d'augmentation de l'écart nodal f_E

Résultat : Carte de taille lissée $\mathcal{M}_t$

Créer une liste O_K ordonnée croissante des hexaèdres K de $\mathcal{T}$ selon l'écart nodal E_K

tant que O_K *n'est pas vide* **faire**

  Retirer le hexaèdres K_{min} de O_K

  $E_f = E_{K_{min}} \cdot f_E$

  si $E_f > E_n$ **alors suivant**

  Lister les hexaèdres voisins à K_{min} dans L_K

  pour chaque $K_i \in L_K$ **faire**

    si $E_{K_i} > E_f$ **alors**

      $E_{K_i} = E_f$

      Ajouter E_{K_i} à O_K

pour chaque *Nœud* $N \in \mathcal{T}$ **faire**

  Lister les hexaèdres connectés à N dans L_K

  Calculer l'écart nodal moyen E_{moyen} des hexaèdres de L_K

  $E_N = E_{moyen}$

retourner $\mathcal{M}_t$

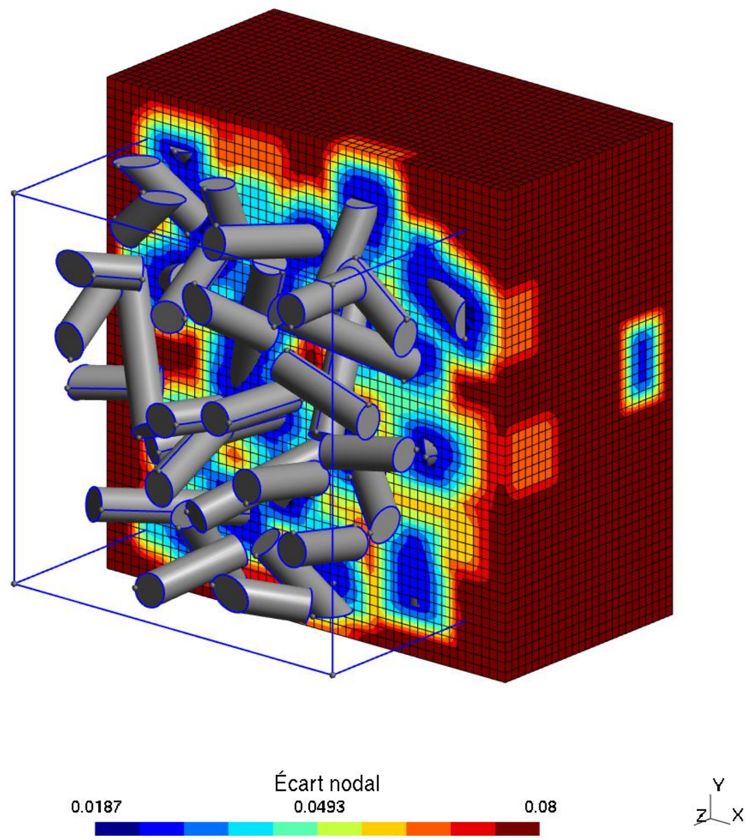


FIGURE 3.27 – Exemple d'une carte de taille. Microstructure composée de particules cylindriques à une fraction volumique de 10%. $E_n = 0.08$, $E_{inter} = 0.02$, $Nb_{ele_{min}} = 2$, $f_E = 1.25$

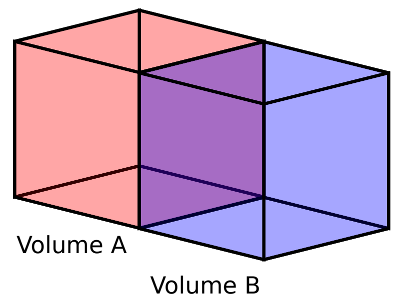
3.3 Génération du maillage

Le maillage de la microstructure doit être généré de façon à être conforme (section 2.3.2.1), posséder des éléments de bonne qualité (section 2.3.2.1) et respecter la carte de taille $\mathcal{M}_t$ décrite dans la section précédente (section 3.2). La méthodologie du maillage des microstructures présentée ci-dessous répond à ces trois critères. D'abord, la section 3.3.1 présente le rôle du concept de co-topologie dans la génération du maillage et le respect de la conformité. Ensuite, les différentes méthodes de génération du maillage en tétraèdres linéaires sont mentionnées à la section 3.3.2. Finalement, le processus de génération des éléments tétraédriques quadratiques est décrit à la section 3.3.3.

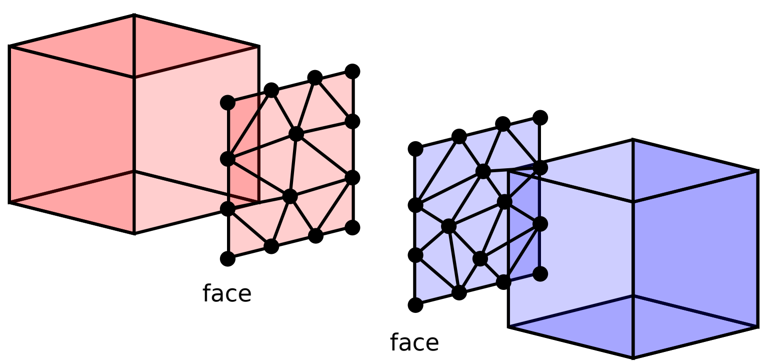
3.3.1 Concept de co-topologie appliqué au maillage

La discrétisation d'un modèle géométrique est effectuée à partir des entités topologiques. Par exemple, le maillage d'un volume selon les méthodes frontales (2D, 3D) débute par la création de nœuds aux sommets, suivi de la discrétisation des arêtes, des faces et finalement du volume. Le volume est ainsi discrétisé en suivant la hiérarchique du modèle BREP. Comme mentionné dans la section 2.3.3.1, la redondance des éléments topologiques du BREP est évitée en utilisant le concept de co-topologie. Cependant, dans les bibliothèques commerciales, l'implémentation de ce concept est souvent restreinte à l'arête (co-arête). Cette limitation ne pose habituellement pas de problème lors du maillage d'un seul volume. Par contre, lorsque deux volumes partagent une même face, si aucune précaution n'est prise, le maillage des volumes sera non conforme puisque la face partagée sera maillée deux fois. Le Modèle de Topologie Unifié (MTU), utilisé dans ce projet, étend le concept de co-topologie aux faces (co-faces).

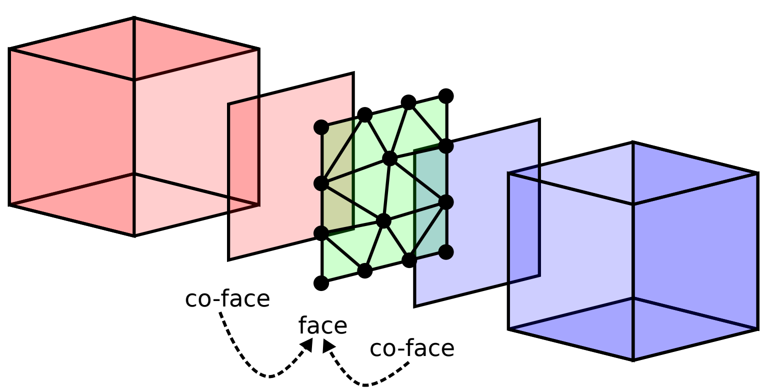
Le concept de co-topologie joue un grand rôle dans la construction du maillage de la microstructure. Les entités topologiques communes à une particule et la matrice qui l'entoure ne sont représentées qu'une seule fois. Cette représentation fait en sorte que l'interface particule/matrice est maillée une seule fois. Ainsi, le maillage aux interfaces est en tout temps conforme puisqu'il n'y a pas de superposition d'éléments. La figure 3.28 illustre le concept de co-topologie appliqué au maillage.



(a)



(b)



(c)

Figure 3.28 – Illustration du concept de co-topologie appliqué au maillage. a) Deux volumes ayant une face similaire. b) Maillage des faces similaires sans la notion de co-face. c) Maillage de la face similaire avec la notion de co-face.

3.3.2 Maillage 1-3D linéaire et Optimisation

Le maillage du modèle géométrique d'une microstructure est généré selon l'approche frontale (section 2.3.2.5). L'approche frontale est robuste et bien adaptée aux cartes de taille ayant des gradients d'écart nodal prononcés. Différents outils de maillage développés et intégrés dans le MTU ont été adaptés au maillage des microstructures.

La génération du maillage linéaire $\mathcal{T}^{lin.}_{M_{struct}}$ débute par la création de nœuds à chaque sommet du modèle géométrique de la microstructure M_{struct}. À partir de ces nœuds, les arêtes sont discrétisées en segments linéaires selon la carte de taille $\mathcal{M}_t$ [66].

La discrétisation des faces est obtenue par la méthode frontale surfacique [63]. Le maillage d'une face débute par l'initialisation d'une liste d'éléments de front à partir des segments des arêtes de la face. La méthode frontale va tenter de faire progresser le front d'éléments en créant de nouveaux triangles linéaires ou en détruisant des triangles existants afin de faire converger le front. Le maillage d'une face prend fin lorsque la liste des éléments de front est vide. La qualité des éléments triangulaires linéaires est optimisée par la relocalisation itérative de nœuds et par la permutation de segments.

Le maillage des volumes est obtenu à partir de la méthode frontale volumique [64]. Une liste déléments de front est initialisée à partir des triangles des faces du volume. La méthode frontale fait progresser le front en créant de nouveaux tétraèdres ou en détruisant des tétraèdres existants. Le maillage du volume prend fin lorsque la liste des éléments de front est vide. La qualité des tétraèdres linéaires est optimisée en relocalisant itérativement des nœuds.

La figure 3.29 illustre le maillage résultant d'une microstructure composée de particules cylindriques à une fraction volumique de 10%. Le résumé de la procédure de maillage des microstructures est présenté à l'algorithme 3.12.

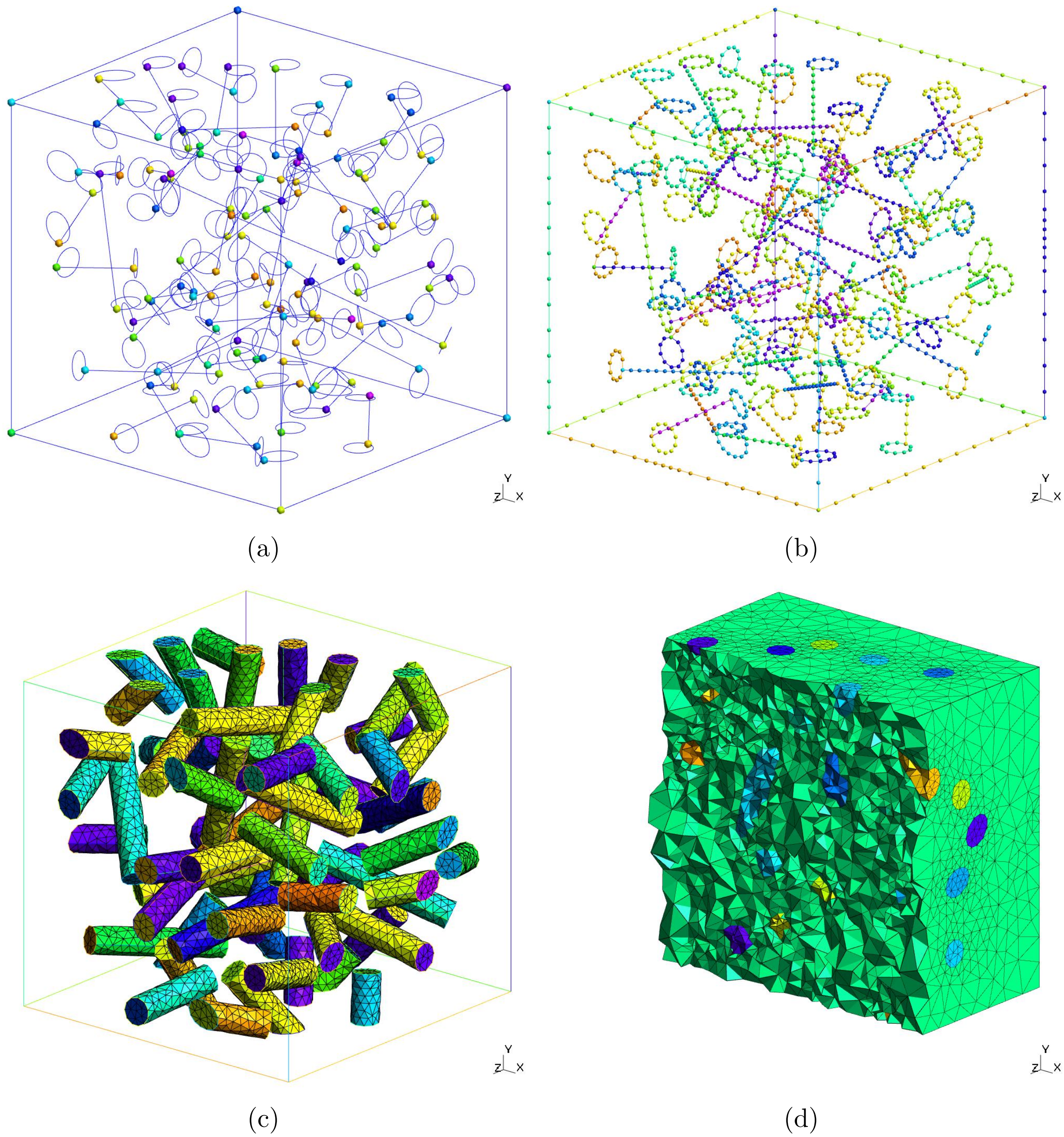


Figure 3.29 – Maillage linéaire d'une microstructure composé de particules cylindriques à une fraction volumique de 10%. La carte de taille de cette microstructure est illustrée à la figure 3.27. a) Nœuds aux sommets. b) Segments sur les arêtes. c) Triangles sur les faces (les faces du cube sont cachées). d) Tétraèdres dans les volumes.

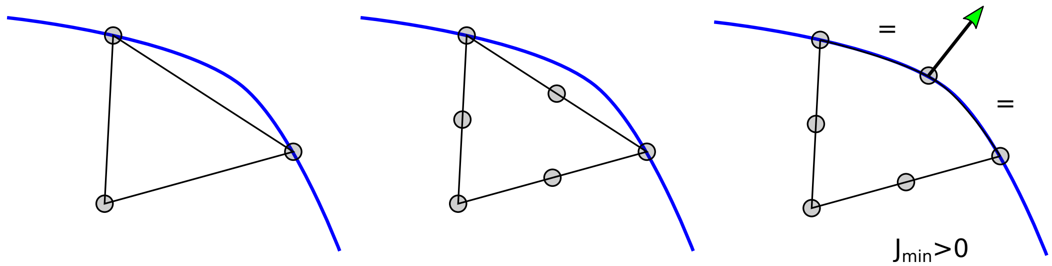
Algorithme 3.12 : Méthode de génération du maillage linéaire $\mathcal{T}^{lin.}_{M_{struct}}$ du modèle géométrique d'une microstructure M_{struct}

Données : Modèle géométrique de la microstructure M_{struct}, Carte de taille $\mathcal{M}_t$
Résultat : Maillage linéaire $\mathcal{T}^{lin.}_{M_{struct}}$

```
pour chaque Sommet S_i ∈ M_struct faire
    Créer un nœud Nd à la position de S_i
pour chaque Arête A_i ∈ M_struct faire
    À partir des Nd de départ et d'arrivé de A_i, discrétiser A_i en segment linéaire
      selon M_t
pour chaque Face F_i ∈ M_struct faire
    Initialiser la liste des éléments de front L_ft2D aux segments de chaque arête
      de F_i
    tant que L_ft2D ≠ ∅ faire
        Faire avancer le front d'éléments en créant des triangles linéaires selon M_t
    Optimiser la qualité des éléments 2D
pour chaque Volume V_i ∈ M_struct faire
    Initialiser la liste des éléments de front L_ft3D aux triangles de chaque face de
      V_i
    tant que L_ft3D ≠ ∅ faire
        Faire avancer le front déléments en créant des tétraèdres linéaires selon
          M_t
    Optimiser la qualité des éléments 3D
retourner T^lin._M_struct
```

3.3.3 Génération des éléments quadratiques

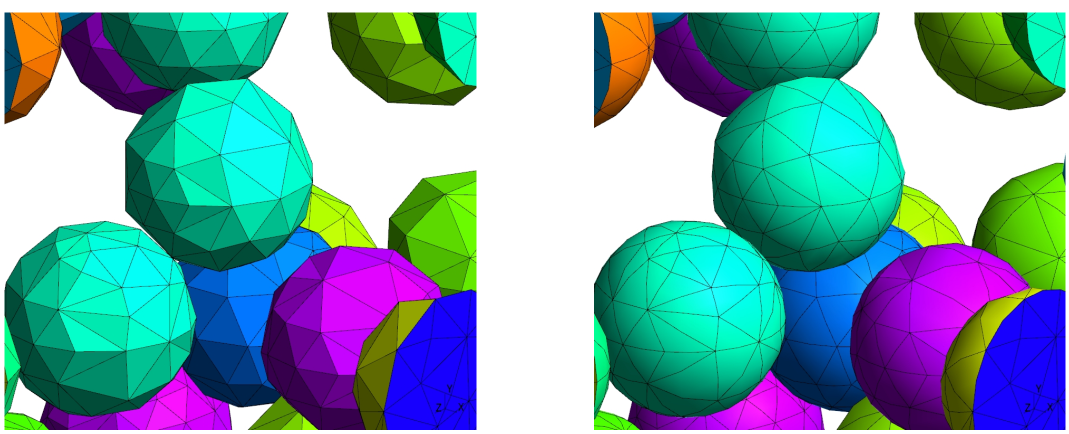
La génération du maillage quadratique $\mathcal{T}^{quad.}_{M_{struct}}$ est effectuée à partir du maillage linéaire $\mathcal{T}^{lin.}_{M_{struct}}$ en ajoutant des nœuds au milieu des segments. Ensuite, chaque nœud appartenant à une entité géométrique courbée (courbe, surface) est projeté sur l'entité de façon à ce que la distance curviligne entre le nœud milieu et les deux autres nœuds soit la même (Fig. 3.30).



(a) (b) (c)

FIGURE 3.30 – Illustration de la création d'un élément quadratique. a) Élément linéaire. b) Ajout des nœuds au milieu des segments. c) Projection du nœud appartenant à l'arête.

Cette projection des nœuds milieux sur les entités géométriques courbées est rendue possible grâce aux outils de la CAO. Elle permet d'obtenir des maillages qui sont plus représentatifs de la géométrie de la microstructure en éliminant l'effet de facettisation. La figure 3.31 illustre la différence entre un maillage linéaire et un maillage quadratique avec nœuds repoussés de particules sphériques. L'effet de facettisation peut avoir une influence significative sur les résultats numériques de la simulation par éléments finis. En effet, le volume d'une particule convexe facettisée n'est pas le même que le volume de la géométrie.



(a) (b)

FIGURE 3.31 – Illustration de la différence entre les maillages linéaire et quadratique de particules sphériques. a) Maillage linéaire. b) Maillage quadratique.

3.3.3.1 Critère de validité

La projection des nœuds milieux appartenant à des entités géométriques courbées peut, dans certains cas, générer des éléments quadratiques dont le jacobien est négatif. Une valeur de jacobien négative entraîne des erreurs numériques lors la la simulation par éléments finis. Le jacobien d'un tétraèdre quadratique est évalué en calculant les coefficients du tétraèdre de Bézier [73]. À partir de ces coefficients, le jacobien minimal et maximal est calculé.

3.3.3.2 Relocalisation des nœuds

Si le jacobien de l'élément est négatif, le ou les nœuds projetés sur des entités courbées sont itérativement relocalisés vers leurs positions non projetées jusqu'à ce que le jacobien redevienne positif et au-dessus d'un seuil prédéterminé. La figure 3.32 illustre le principe de relocalisation d'un nœud. En 3.32a, deux triangles linéaires dont un même segment appartient à une arête courbe (bleu). En 3.32b les nœuds milieux sont ajoutés. En 3.32c le nœud milieu est repoussé sur la courbe ce qui entraîne un jacobien négatif ($J_{min} = -0.1$). En 3.32d, une première itération de relocalisation du nœud rehausse le jabobien ($J_{min} = 0.0$). Finalement, en 3.32e, une seconde itération de relocalisation ramène le jacobien à une valeur supérieure au seuil de 0.1.

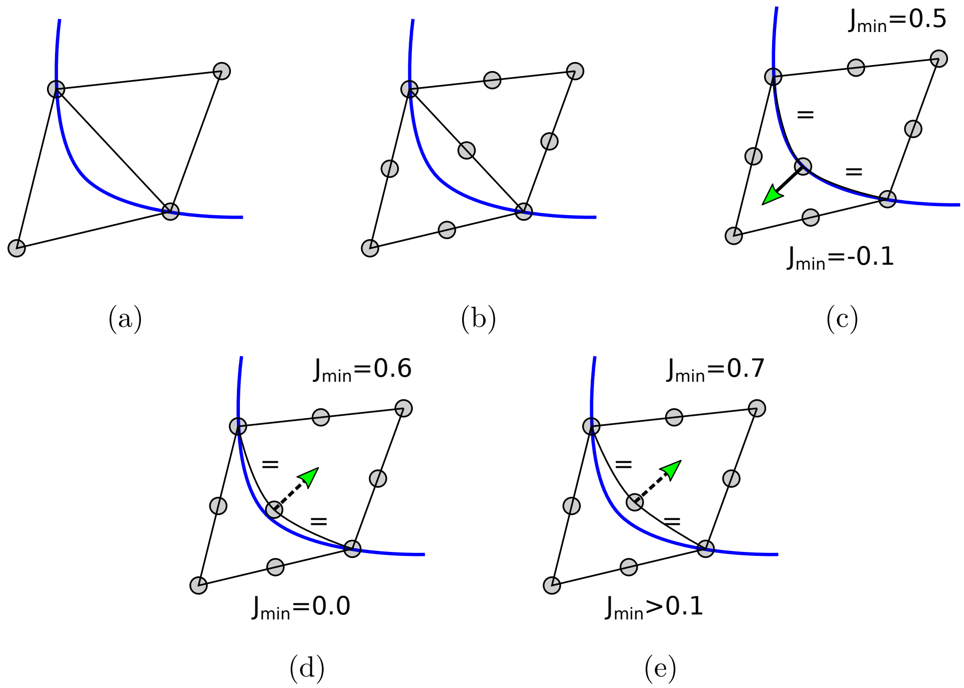


FIGURE 3.32 – Illustration de la relocalisation d'un nœud lorsque le jacobien d'un élément est négatif.

3.3.3.3 Choix de la méthode de relocalisation

La génération d'éléments de maillage quadratiques courbés valides est un sujet qui a été largement étudié et plusieurs approches ont étés publiées [74–76]. Le choix de la méthode de relocalisation itérative des nœuds est justifié par la simplicité de la méthode et de sa mise en application et sa rapidité d'exécution. De plus, suite à plusieurs essais, il fut constaté que moins de 1.0% des éléments tétraédriques nécessitaient une relocalisation de nœud.

3.3.4 Analyse du maillage

La fraction volumique de chaque constituant (section 3.3.4.1), la qualité des tétraèdres linéaires (section 3.3.4.2) et le nombre de tétraèdres (section 3.3.4.3) sont évalués pour chaque VES.

3.3.4.1 Fraction volumique des constituants

L'évaluation de la fraction volumique f_{vol} des différents constituants $\mathcal{C}_i$ (ex $\mathcal{C}_1 = \mathcal{M}, \mathcal{C}_2 = \mathcal{P}$) peut être effectuée à partir du maillage de la microstructure $\mathcal{T}_{M_{struct}}$ à l'aide des outils de maillage. L'évaluation de $V_{\mathcal{C}_i}$ à l'aide de $\mathcal{T}_{M_{struct}}$ passe par la liste de volumes $L_{V_{\mathcal{C}_i}}$. En effet, puisque chaque élément de maillage K est associé à une entité topologique, il est facile de retrouver chaque élément appartenant à $\mathcal{C}_i$. Le volume d'un élément de maillage est calculé par la méthode d'intégration de Gauss. La moyenne et l'écart-type de la fraction volumique de chaque constituant sont évalués pour chaque VES.

3.3.4.2 Qualité des tétraèdres linéaires

La moyenne, l'écart-type et la distribution de la qualité des éléments tétraédriques linéaires sont évalués pour chaque VES. Le critère de qualité est mentionné à l'équation 2.54 de la section 2.3.2.1.

3.3.4.3 Nombre de tétraèdres

La moyenne et l'écart-type du nombre d'éléments tétraédriques sont évalués pour chaque VES.

3.4 Génération des études en éléments finis

L'étude numérique du comportement mécanique et thermique des matériaux est réalisée à l'aide de la méthode des éléments finis (EF). Dans ce projet, des études linéaires statiques en mécanique et thermique sont réalisées. L'objectif de ces études numériques et de caractériser le comportement thermomécanique apparent d'une microstructure.

Les sections qui suivent détaillent le processus de génération des études EF pour les deux types de problèmes mentionnés. L'interaction du modèle de topologie unifié (MTU) avec le solveur EF est présentée à la section 3.4.1. L'étude du comportement mécanique apparent est détaillée à la section 3.4.2 et l'étude du comportement thermique apparent est détaillée à la section 3.4.3.

3.4.1 Interaction entre le MTU et le solveur EF

La bibliothèque opensource *Code_Aster* [77] est utilisé comme solveur éléments finis et est encapsulé dans l'environnement du MTU. Cette encapsulation est dite «par fichiers» puisque l'environnement du MTU génère automatiquement les fichiers nécessaires au bon fonctionnement du solveur, lance automatiquement les calculs et récupère les résultats en important les fichiers résultats du solveur [66].

Le MTU lie ensemble les entités topologiques du modèle géométrique avec les éléments de maillage. Ce lien permet de facilement partitionner le maillage selon des groupes de mailles correspondant aux différentes entités topologiques. Ces groupes sont nommés selon un code interne au MTU correspondant aux entités topologiques et sont transférés dans le fichier de maillage du solveur EF selon le format approprié. Ainsi, il est possible de générer des fichiers de maillage pour d'autres solveur EF. Dans le MTU, les propriétés des matériaux sont directement liées aux éléments topologiques du modèle géométrique. Dans ce projet, les propriétés des matériaux de la microstructure sont liées aux entités volumiques qui définissent les particules et la matrice. Par le biais du lien entre une entité topologique et ses éléments de maillage, les propriétés des matériaux sont directement associées aux bons groupes de mailles et transférées dans le fichier de commande du solveur EF. Les conditions aux limites sont, elles aussi, imposées sur les entités topologiques. Tout comme pour les propriétés des matériaux, les conditions aux limites sont associées aux groupes de mailles et transférées dans le fichier de commande du solveur EF.

Le script de commandes de l'étude EF est ainsi généré automatiquement selon le type de problème à résoudre. Cette automatisation fait en sorte que l'utilisateur n'a pas à se soucier de la mise en application de son étude dans le solveur EF. Cette mise en application est effectuée de façon générale une seule fois lors du développement du

MTU. Cette encapsulation permet d'utiliser indépendamment plusieurs solveurs EF et permet de gérer facilement le changement de version d'un même solveur.

La résolution de l'étude EF est automatiquement démarrée par l'environnement du MTU et les résultats sont automatiquement importés. Ces résultats sont liés aux éléments de maillage et par conséquent aux entités topologiques ce qui facilite grandement l'analyse des résultats.

3.4.2 Caractérisation du comportement mécanique apparent

Le comportement mécanique apparent d'une microstructure est caractérisé en évaluant la réponse des VES à différents chargements homogènes sur le contour. Dans ce projet, les matériaux étudiés sont considérés comme ayant un comportement élastique isotrope. Ainsi, les propriétés mécaniques élastiques sont représentées par deux coefficients soit le module de compressibilité apparent et le module de cisaillement apparent.

3.4.2.1 Caractérisation du module de compressibilité apparent

Le module de compressibilité apparent K_{app} de chaque VES est calculé à partir des tenseurs de déformations $\underline{\underline{E}}$ et contraintes $\underline{\underline{\Sigma}}$ macroscopiques obtenus selon une sollicitation purement sphérique (hydrostatique) leur donnant la forme respective suivante :

$$\underline{\underline{E}} = \begin{bmatrix} E & 0 & 0 \\ 0 & E & 0 \\ 0 & 0 & E \end{bmatrix} \qquad \text{ou} \qquad \underline{\underline{\Sigma}} = \begin{bmatrix} \Sigma & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma & 0 \\ 0 & 0 & \Sigma \end{bmatrix} \tag{3.10}$$

Les sollicitations purement sphériques sont obtenues en appliquant ces conditions aux limites sur le contour du VES en déformations homogènes (CLDH) et en contraintes homogènes (CLCH).

Chargement sphérique en CLDH

Le chargement purement sphérique en CLDH est obtenu en appliquant simultanément les déplacements imposés D_x, D_y, D_z en fonction de x, y, z et de u, la valeur du déplacement, sur chaque plan de l'enveloppe du VES (cube unitaire) comme illustré à la figure 3.33. Ce chargement a pour effet de dilater le VES de façon proportionnelle selon les axes x, y, z de la valeur u.

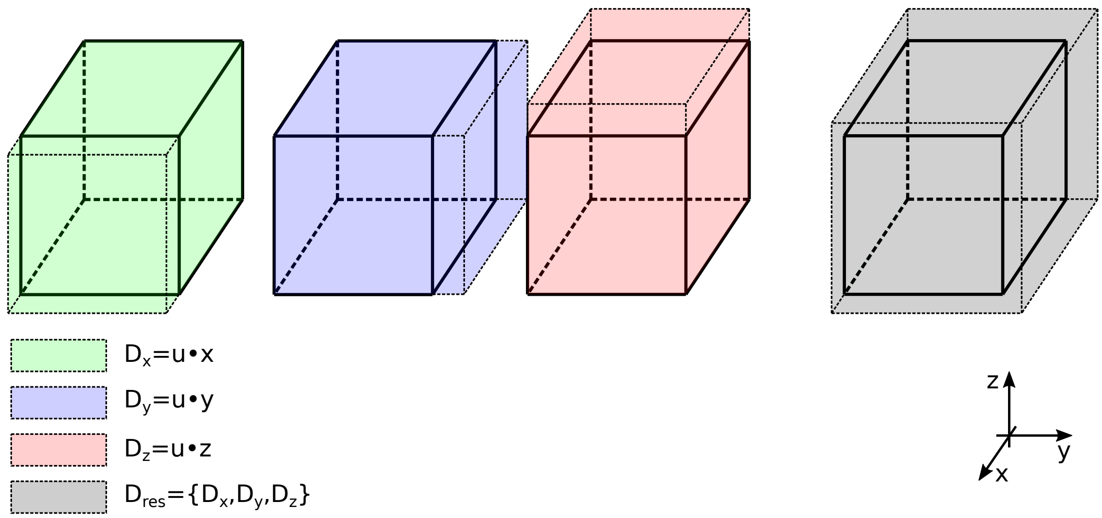


Figure 3.33 – Illustration des conditions aux limites en déformations homogènes sur le contour pour un chargement purement sphérique.

Chargement sphérique en CLCH

Le chargement purement sphérique en CLCH est obtenu en bloquant le déplacement des nœuds des plans $(x = 0, y, z)$, $(x, y = 0, z)$ et $(x, y, z = 0)$ dans la direction normale aux plans et en appliquant simultanément une pression t normale aux trois autres plans du VES comme illustré à la figure 3.34. Les blocages et pressions normales aux plans ont pour effet de dilater le VES selon les axes du repère.

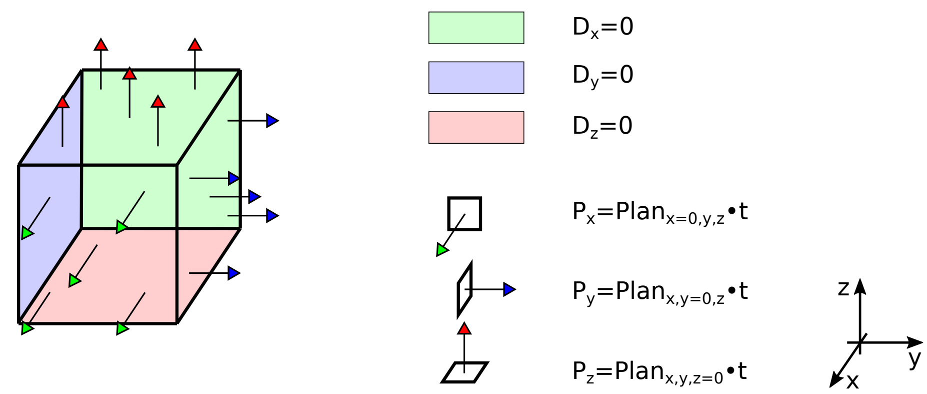


FIGURE 3.34 – Illustration des conditions aux limites en contraintes homogènes sur le contour pour un chargement purement sphérique.

3.4.2.2 Caractérisation du module de cisaillement apparent

Le module de cisaillement apparent G_{app} de chaque VES est calculé à partir des tenseurs de déformations $\underline{\underline{E}}$ et contraintes $\underline{\underline{\Sigma}}$ macroscopique obtenus selon une sollicitation purement déviatorique leur donnant la forme respective suivante :

$$\underline{\underline{E}} = \begin{bmatrix} 0 & E & E \\ E & 0 & E \\ E & E & 0 \end{bmatrix} \qquad \text{ou} \qquad \underline{\underline{\Sigma}} = \begin{bmatrix} 0 & \Sigma & \Sigma \\ \Sigma & 0 & \Sigma \\ \Sigma & \Sigma & 0 \end{bmatrix} \tag{3.11}$$

Les sollicitations purement déviatoriques sont obtenues en appliquant les conditions aux limites CLDH et CLCH.

Chargement déviatorique en CLDH

Le chargement purement déviatorique en CLDH est obtenu en appliquant simultanéments les déplacements imposés $D_x = u \cdot (y + z)$, $D_y = u \cdot (x + z)$, $D_z = u \cdot (x + y)$ sur chaque plan de l'enveloppe du VES (cube unitaire) comme illustré à la figure 3.35. Ces déplacements imposés font en sorte que le VES est soumis uniquement à des cisaillements.

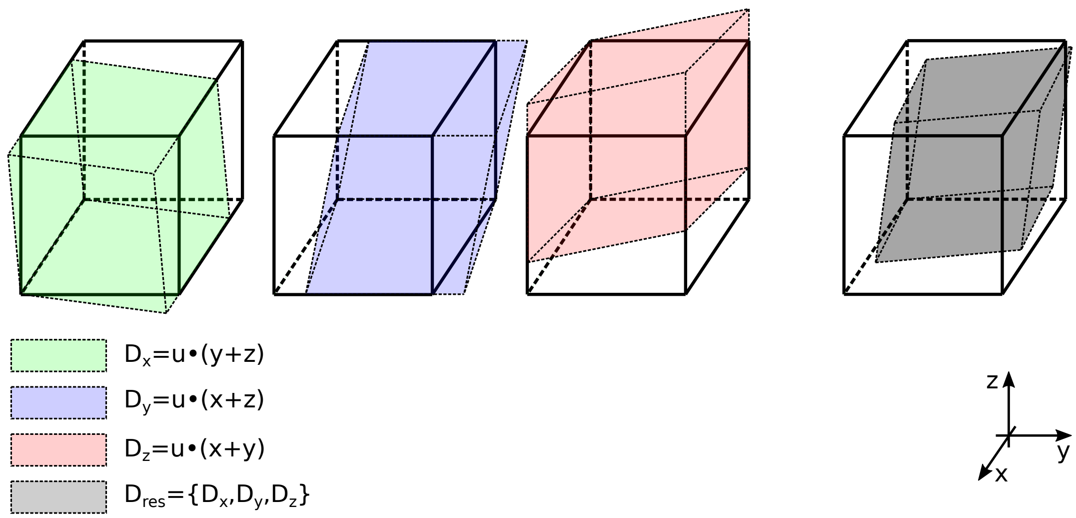


FIGURE 3.35 – Illustration des conditions aux limites en déformations homogènes sur le contour pour un chargement purement déviatorique.

Chargement déviatorique en CLCH

Le chargement purement déviatorique en CLCH est obtenu en imposant une pression tangente aux plans du VES et en bloquant trois nœuds du VES afin d'éliminer les mouvements de solide rigide comme illustré à la figure 3.36. Les pressions sont appliquées de façon à induire le cisaillement du VES dans les plans xy, yz, xz.

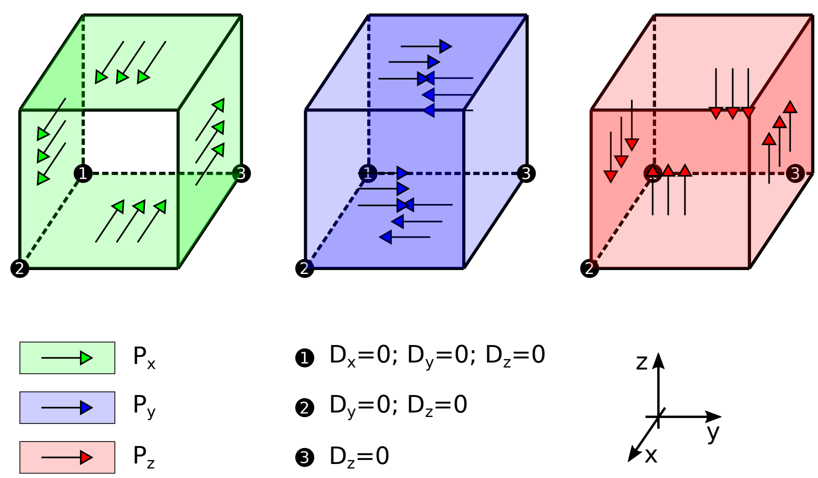


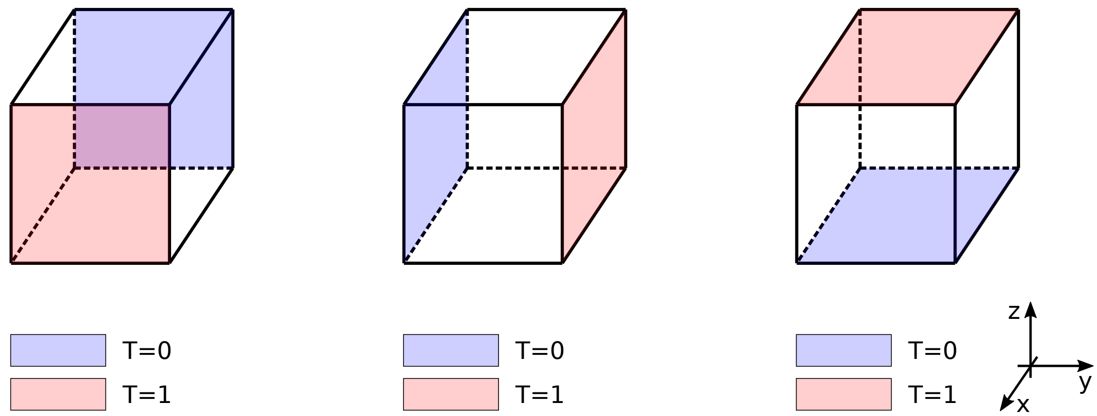
FIGURE 3.36 – Illustration des conditions aux limites en contraintes homogènes sur le contour pour un chargement purement déviatorique.

3.4.3 Caractérisation du comportement thermique apparent

Le comportement thermique apparent d'une microstructure est caractérisé en évaluant la réponse thermique des VES à divers chargements thermiques. Dans le cadre de ce projet, les conductivités thermiques sont évaluées en sollicitant le VES à des conditions aux limites de gradients de température (CLG) et à des conditions aux limites de flux thermiques (CLF). Contrairement aux essais numériques en mécanique, les conductivités thermiques λ_x, λ_y, λ_z sont évaluées individuellement.

3.4.3.1 Caractérisation des conductivités thermiques en CLG

Une différence de température est appliqué sur deux plans opposés et un flux nul est appliqué sur les autres plans (Fig. 3.37) selon les trois cas différents de chargement en conditions aux limites mixtes.

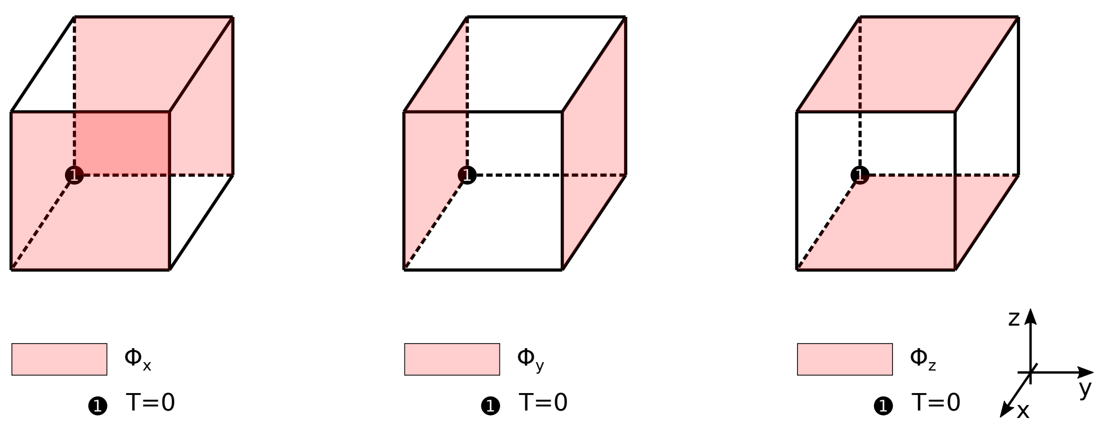


(a) (b) (c)

FIGURE 3.37 – Illustration des conditions aux limites en gradient de température sur le contour. a) Gradient de température orienté selon l'axe x. b) Gradient de température orienté selon l'axe y. c) Gradient de température orienté selon l'axe z.

3.4.3.2 Caractérisation des conductivités thermiques en CLF

Un flux homogène est appliqué sur deux plans opposés et un flux nul est appliqué sur les autres plans (Fig. 3.38) selon les trois cas de chargement. La température du nœud à l'origine est imposée.



(a) (b) (c)

FIGURE 3.38 – Illustration des conditions aux limites en flux sur le contour. a) Flux orienté selon l'axe x. b) Flux orienté selon l'axe y. c) Flux orienté selon l'axe z.

3.4.4 Moyenne volumique des champs et calcul des propriétés thermomécaniques apparentes

Le calcul de la moyenne volumique d'un champ est décrit à la section 3.4.4.1 et les calcul des propriétés thermomécaniques apparentes sont décrites aux sections 3.4.4.2 et 3.4.4.3.

3.4.4.1 Moyenne volumique des champs

La moyenne volumique d'un champ, telle que définie à l'équation 2.1, est calculée à partir des résultats aux points de Gauss de chaque élément. La moyenne volumique peut être calculée sur l'ensemble de la microstructure $\mathcal{T}_{M_{struct}}$:

$$\langle A \rangle_{V_{VES}} = \frac{1}{V_{VES}} \int_{V_{VES}} A(\underline{x}) dV = \frac{1}{V_{\mathcal{T}_{M_{struct}}}} \sum_{Nb_K \in \mathcal{T}_{M_{struct}}}^{i=1} A_{K_i} V_{K_i} \tag{3.12}$$

où A représente un champ (scalaire, vecteur ou tenseur), A_{K_i} le champ local de l'élément K_i, V_{K_i} le volume de l'élément K_i et $V_{\mathcal{T}_{M_{struct}}}$ le volume total des éléments de la microstructure.

3.4.4.2 Module d'élasticité apparent

Dans le cadre de ce projet, le comportement mécanique macroscopique des matériaux étudiés est considéré comme étant isotrope. En effet, puisque la distribution spatiale des particules et leur orientation sont isotropes, le matériau peut être considéré comme étant isotrope à l'échelle mésoscopique. Le calcul du module de compressibilité apparent K_{app}, du module de cisaillement apparent G_{app} repose sur cette hypothèse d'isotropie. Cette hypothèse ne serait pas vérifiée si, par exemple, la distribution de l'orientation des particules n'était pas isotrope. La démarche de modélisation numérique des VES est applicable aux matériaux dont le comportement mécanique macroscopique est orthotrope. Seulement les cas de chargement et le calculs des propriétés mécaniques apparentes diffèrent.

Module de compressibilité apparent

Le module de compressibilité K_{app} apparent est obtenu à partir d'un chargement purement sphérique selon des conditions aux limites en CLCH ou CLDH :

$$K_{app} = \frac{Tr(\underline{\underline{\Sigma}})}{3Tr(\underline{\underline{E}})} \tag{3.13}$$

Module de cisaillement apparent

Le module de cisaillement apparent G_{app} est obtenu à partir d'un chargement purement déviatorique selon des conditions aux limites en CLCH ou CLDH et est calculé par la moyenne des modules de cisaillement des plans xy, yz et xz.

$$G_{app} = \frac{1}{3}\left(\frac{\Sigma_{xy}}{2E_{xy}} + \frac{\Sigma_{yz}}{2E_{yz}} + \frac{\Sigma_{xz}}{2E_{xz}}\right) \tag{3.14}$$

Module d'élasticité apparent

Le module d'élasticité apparent est obtenu à partir du module de compressibilité apparent K_{app} et du module de cisaillement apparent G_{app}.

$$E_{app} = \frac{9K_{app}G_{app}}{3K_{app} + G_{app}} \tag{3.15}$$

3.4.4.3 Conductivités thermiques apparentes

La conductivité thermique apparente selon l'axe i est obtenue à partir du flux thermique Φ_i et du gradient thermique G_i d'un chargement thermique axial en CLF ou CLG. Le gradient G_i est calculé pour chaque éléments à partir du flux thermique et de la conductivité thermique de l'élément.

$$\lambda_{app_i} = -\frac{\Phi_i}{G_i} \tag{3.16}$$

La conductivité thermique apparente est obtenue à partir de la moyenne des conductivités thermiques apparentes selon les axes x, y, z.

$$\lambda_{app} = \frac{\lambda_{app_x} + \lambda_{app_y} + \lambda_{app_z}}{3} \tag{3.17}$$

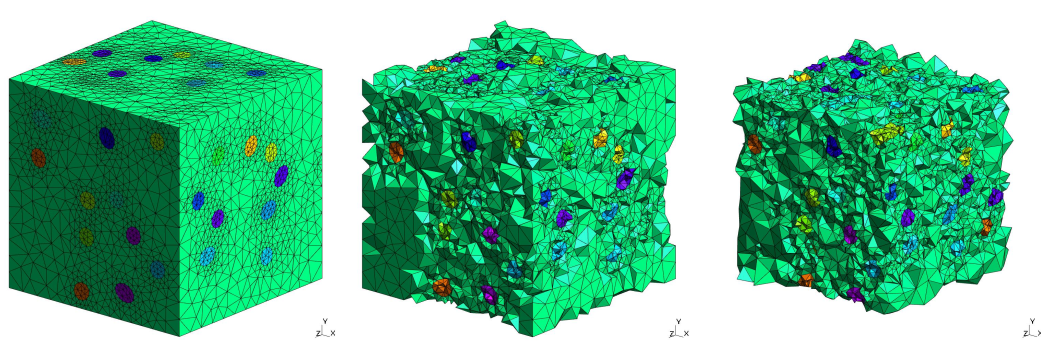
3.5 Effets de bord et méthode d'érosion

DiPaola et al. [17] ont observé que la différence entre les résultats numériques obtenus avec les conditions CLDH et CLCH est plus importante aux bords du VES. Afin d'évaluer l'influence des effets de bord sur les propriétés apparentes, une méthode d'érosion du VES a été proposée [17]. Elle consiste à éroder progressivement le VES vers son centre selon une distance d'érosion et de recalculer les propriétés apparentes. Il fut observé que plus la distance d'érosion augmente, plus les résultats en CLDH et CLCH convergent vers les mêmes valeurs.

Dans ce projet, la méthode d'érosion est utilisée pour s'affranchir des effets de bord des conditions aux limites, mais aussi pour contrer le manque possible de particules aux bords du VES lors de la génération de la géométrie par la dynamique des corps rigides (DCR). En effet, tel que mentionné à la section 3.1.5.3, une particule positionnée par la méthode DCR qui ne respecte pas les critères d'insertion (Section 3.1.3) ne sera pas insérée provoquant ainsi une absence de particules. Dans ce cas précis, seul, les particules qui sont proches ou sur le bord du VES peuvent ne pas être insérées. La méthode d'érosion est utilisée pour ne considérer que les champs locaux suffisamment distants des bords du VES là où les particules sont toutes présentes.

3.5.1 Description de la méthode d'érosion

Afin d'éviter les effets de bord du modèle numérique, le VES est progressivement érodé vers son centre selon une distance d'érosion d_e. Tous les éléments de maillage dont le centre de leur boîte englobante est présent dans le cube défini par la distance d'érosion sont préservés (figure 3.39).



(a) (b) (c)

FIGURE 3.39 – Illustration de l'érosion d'un VES. a) VES sans érosion. b) $d_e = 0.1$. c) $d_e = 0.2$

La moyenne volumique d'un champ érodé $\langle A \rangle_{V_{d_e}}$ est redéfinie (Eq. 3.18) et les propriétés apparentes sont recalculées.

$$\langle \underline{\underline{A}} \rangle_{V_{d_e}} = \frac{1}{V_{d_e}} \int_{V_{d_e}} \underline{\underline{A}}(\underline{x}) dV \tag{3.18}$$

3.5.1.1 Écarts de chargement

Les modules de compressibilité et de cisaillement apparents sont déterminés à partir des chargements purement sphériques et déviatoriques. Afin de vérifier si les tenseurs de déformation et de contraintes sont toujours sphériques ou déviatoriques à une distance d'érosion donnée, l'écart de chargement en fonction de la distance d'érosion est calculé [17].

3.5.1.2 Écart de chargement sphérique

L'écart de chargement pour chaque composante $\underline{\underline{\delta^S}}(a_{ij})$ du tenseur $\underline{\underline{a}}$ est calculé comme suit :

$$\underline{\underline{\delta^S}}(a_{ij}) = \left| \frac{3\langle a_{ij} \rangle_{V_{d_e}}}{\langle a_{11} \rangle_{V_{d_e}} + \langle a_{22} \rangle_{V_{d_e}} + \langle a_{33} \rangle_{V_{d_e}}} \right| - \delta_{ij} \tag{3.19}$$

où a_{ij} représente une composante du tenseur $\underline{\underline{a}}$, $\langle a_{ij} \rangle_{V_{d_e}}$ la moyenne volumique de a_{ij} selon la distance d'érosion d_e et δ_{ij} le tenseur de Kronecker.

L'écart de chargement $\Delta^S(\underline{\underline{a}})$ du tenseur est calculé comme suit :

$$\Delta^S(\underline{\underline{a}}) = \frac{1}{9} \left(|\delta^S(a_{11})| + |\delta^S(a_{22})| + |\delta^S(a_{33})| + 2|\delta^S(a_{12})| + 2|\delta^S(a_{23})| + 2|\delta^S(a_{13})| \right) \tag{3.20}$$

3.5.1.3 Écart de chargement déviatorique

L'écart de chargement pour chaque composante $\underline{\underline{\delta^D}}(a_{ij})$ du tenseur $\underline{\underline{a}}$ est calculé en considérant les composantes de cisaillement égales entre elles :

$$\underline{\underline{\delta^D}}(a_{ij}) = \left| \frac{3\langle a_{ij}\rangle_{V_{d_e}}}{\langle a_{12}\rangle_{V_{d_e}} + \langle a_{23}\rangle_{V_{d_e}} + \langle a_{13}\rangle_{V_{d_e}}} \right| - (1 - \delta_{ij}) \tag{3.21}$$

L'écart de chargement $\Delta^D(\underline{\underline{a}})$ du tenseur est calculé comme suit :

$$\Delta^D(\underline{\underline{a}}) = \frac{1}{9}\Big(|\delta^D(a_{11})| + |\delta^D(a_{22})| + |\delta^D(a_{33})| + 2|\delta^D(a_{12})| + 2|\delta^D(a_{23})| + 2|\delta^D(a_{13})|\Big) \tag{3.22}$$

3.5.1.4 Écart d'énergie potentielle de déformation

L'énergie potentielle de déformation e^{pot} est calculée pour chaque élément du VES :

$$e^{pot} = \frac{1}{2}\int_K \underline{\underline{\varepsilon}} : \mathcal{C} : \underline{\underline{\varepsilon}} \tag{3.23}$$

où $\mathcal{C}$ est le tenseur des rigidités de l'élément K.

La moyenne volumique de e^{pot} sur le VES complet est notée $\langle e^{pot}\rangle_V$ et la moyenne volumique sur le VES érodé est notée $\langle e^{pot}\rangle_{V_{de}}$. L'écart relatif entre $\langle e^{pot}\rangle_V$ et $\langle e^{pot}\rangle_{V_{de}}$ est calculé en fonction de la distance d'érosion $\Delta^{ed}(d_e)$ afin de visualiser la variation de $\langle e^{pot}\rangle_V$:

$$\Delta^{e^{pot}}(d_e) = \frac{\langle e^{pot}\rangle_{V_{de}} - \langle e^{pot}\rangle_V}{\langle e^{pot}\rangle_V} dV \tag{3.24}$$

3.5.1.5 Écart entre le travail macroscopique et la moyenne volumique du travail mésoscopique

Un calcul de l'écart relatif $\Delta^{Hill}(d_e)$ entre le travail macroscopique $\underline{\underline{E}}_{d_e} : \underline{\underline{\Sigma}}_{d_e}$ et la moyenne volumique du travail mésoscopique $\langle \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\sigma}}\rangle_{V_{d_e}}$ en fonction de la distance d'érosion d_e est effectué afin d'évaluer le respect de la condition de macro-homogénéité de Hill (section 2.1.4.2) :

$$\Delta^{Hill}(d_e) = \frac{\langle \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\sigma}}\rangle_{V_{d_e}} - \underline{\underline{E}}_{d_e} : \underline{\underline{\Sigma}}_{d_e}}{\underline{\underline{E}}_{d_e} : \underline{\underline{\Sigma}}_{d_e}} \tag{3.25}$$

3.6 Démarche d'automatisation

De la génération du modèle géométrique jusqu'au post-traitement des résultats numériques, une multitude d'étapes s'enchaînent et de nombreux paramètres entrent en jeu. Compte tenu du nombre élevé de réalisations qu'impose une représentation statistique fiable, l'intervention de l'utilisateur dans ce processus de simulation doit être minimale. La démarche de modélisation numérique des matériaux hétérogènes présentée est élaborée de sorte à être la plus générale possible et ainsi offrir une large gamme de possibilité de simulation. C'est dans cette optique d'une approche générale, mais automatisée que fut mise en œuvre cette méthode de modélisation numérique des matériaux hétérogènes.

La séquence de génération automatique d'un groupe de VES suit deux approches. Lorsque la taille du VES est petite, la génération des VES s'effectue de façon parallèle. Ainsi, plusieurs VES sont générés en même temps selon le nombre de fils d'exécution disponibles et des ressources en mémoire. Lorsque la taille du VES est grande et que les moyens de calculs sont limités la génération des VES s'effectue de façon séquentielle. Cette génération séquentielle peut tirer profit de la parallélisation des méthodes de résolutions de la MEF mais le gain de temps n'évolue pas de façon linéaire plus il y a de fils d'exécution.

Lorsque tous les VES ont été générés, une procédure de compilation des résultats est utilisée pour calculer les moyennes, les écarts-types et les distributions des différents résultats numériques et ces valeurs sont automatiquement détaillées sous forme de tableaux et de graphiques.

Une description de la mise en application de la démarche d'automatisation est présentée à l'annexe A.

Chapitre 4

Étude des effets de la géométrie des particules et du maillage sur les propriétés apparentes

Ce chapitre présente une application de la méthode de construction automatique des modèles numériques décrite au chapitre précédent. Plus spécifiquement, cette application vise à mettre en évidence l'intérêt d'utiliser l'approche intégrée (CAO, maillage et MEF). Une étude comparative de l'effet de la géométrie des particules et du degré du maillage sur les propriétés apparentes d'un matériau composite à matrice époxy renforcée par des particules de verre est réalisée. Le plan d'expériences de l'étude est présenté à la section 4.1 et les résultats sont analysés à la section 4.2. Une discussion sur l'intérêt de l'approche intégrée pour la modélisation par la MEF des microstructures de matériaux hétérogènes est présentée à la section 4.3.

4.1 Plan d'expériences numérique

Le plan d'expériences est divisé en quatre sous-sections : la définition du matériau (section 4.1.1), la génération de la géométrie (section 4.1.2), du maillage (section 4.1.3) et des études EF (section 4.1.4).

4.1.1 Définition du matériau

Le matériau étudié est un composite à matrice époxy renforcée par des particules de verre. Le comportement mécanique et thermique des particules de verre et de la matrice est considéré comme étant isotrope. L'interface particule/matrice est supposée comme étant parfaite et aucun décollement n'est possible. Les propriétés des matériaux sont rapportées à la table 4.1. Le contraste élevé entre les modules d'élasticité de la matrice et des particules ($E_{particule}/E_{matrice} = 20.7$) et les conductivités thermiques ($\lambda_{matrice}/\lambda_{particule} = 8.6$) confère au composite son caractère hétérogène.

Table 4.1 – Propriétés des matériaux

Constituants	$E(GPa)$	ν	$\lambda(W.m^{-1}.K^{-1})$
Particules - Verre	72.3	0.22	1.20
Matrice - Époxyde	3.5	0.33	0.14

4.1.2 Génération de la géométrie

Le domaine de la microstructure est défini par un cube unitaire. Les particules de verre sont représentées par des sphères (S) ou des cylindres (C) identiques selon deux tailles soit un diamètre $Dia. = 1/6$ (S1) ou $Dia. = 1/8$ (S2) pour les particules sphériques et $Dia. = 0.085$ (C1) ou $Dia = 0.064$ (C2) avec un ratio de longueur sur diamètre $L/D = 5$ pour les particules cylindriques. Les paramètres géométriques des sphères et cylindres ont été choisis de façon à ce que le volume de S1 soit égale au volume de C1 de même pour S2 et C2. Dans la littérature, la taille des particules sphériques est souvent représentée selon le nombre de diamètres de particule nécessaire pour obtenir la dimension du cube unitaire. Par exemple, la sphère S1 serait notée $6D$, car le diamètre de la particule est 1/6 de la dimension du cube unitaire. Cette notation n'est pas employée ici, car elle n'est pas applicable aux particules cylindriques à cause de leur longueur. Les microstructures sont générées selon deux fractions volumiques cibles : $f_{vol} = 5\%$ (FV05) et $f_{vol} = 10\%$ (FV10). La liste des types d'échantillons numériques et du nombre de réalisations est disponible à la table 4.2. Le nombre de VES pour les microstructures S2FV10 et C2FV10 est plus petit que celui des autres microstructures en raison de la la taille des VES.

Table 4.2 – Liste des essais numériques

Particules	Nom	$Geo_{\mathcal{P}}$	f_{vol} (%)	Nombre de VES
Sphère	S1FV05	$Dia = 1/6$	5%	100
	S1FV10	$Dia = 1/6$	10%	100
	S2FV10	$Dia = 1/8$	10%	20
Cylindre	C1FV05	$Dia = 0.085, L/D = 5$	5%	100
	C1FV10	$Dia = 0.085, L/D = 5$	10%	100
	C2FV10	$Dia = 0.064, L/D = 5$	10%	20

Le modèle géométrique des microstructures est obtenu à l'aide de l'algorithme d'insertion de particules de type RSA. Les paramètres du générateur RSA sont répertoriés à la table 4.3. Les valeurs des paramètres sont identiques pour tous les types d'échantillons à l'exception de la distance minimale entre les volumes qui est plus grande pour les particules sphériques (0.040) que pour les particules cylindriques (0.030, 0.020). Les particules cylindriques sont plus difficiles à insérer que les particules sphériques, car elles sont élancées. Afin de faciliter l'insertion, la distance minimale entre les particules cylindriques est abaissée par rapport à celle des particules sphériques. Cette distance est aussi réduite avec les particules C2 car elles sont plus petites et difficiles à insérer. Les particules sont disposées et orientées aléatoirement à l'intérieur d'une boîte de distribution (table 4.4).

Table 4.3 – Paramètres du générateur RSA

	S1FV05 S1FV10 S2FV10	C1FV05 C1FV10	C2FV10
Distance min. entre volumes	0.040	0.030	0.020
Volume min.	0.001		
Aire min.	0.002		
Longueur min.	0.020		
Angle min. entre faces (rad)	0.785		

Table 4.4 – Boîte de distribution

Particules	X_{min}	Y_{min}	Z_{min}	X_{max}	Y_{max}	Z_{max}
Sphère	-0.1	-0.1	-0.1	1.1	1.1	1.1
Cylindre	-0.2	-0.2	-0.2	1.2	1.2	1.2

4.1.3 Génération du maillage

La génération du maillage débute avec la construction de la carte de taille. Les différentes propriétés de la carte sont répertoriées à la table 4.5. La valeur de l'écart nodal aux interfaces particule/matrice E_{inter} est plus petite pour les particules cylindriques (0.020) que pour les particules sphériques (0.040) afin d'assurer une modélisation adéquate compte tenu du diamètre inférieur des particules cylindriques qui fait en sorte que la courbure de la surface est plus élevée. Les différents échantillons numériques sont maillés en tétraèdres linéaires (4 nœuds)ou tétraèdres quadratiques (10 nœuds) selon la carte de taille. Les nœuds milieux des éléments quadratiques appartenant à des entités géométriques courbées (courbe non rectiligne et surface non plane) sont repoussés sur sur la courbe ou sur la surface tout en garantissant que le nœud milieu est parfaitement au centre afin de représenter le plus fidèlement possible la géométrie.

TABLE 4.5 – Propriétés de la carte de taille

	(S1, S2)	(C1, C2)
E_n	0.080	
E_{inter}	0.040	0.020
$Nb_{ele_{min}}$	2	
f_E	1.250	
n_x, n_y, n_z	50	
Nb_{pas}	8	

4.1.4 Génération des études EF

Les comportements mécaniques et thermiques linéaires du composite verre/époxyde sont considérés comme isotropes. Le comportement mécanique linéaire apparent est caractérisé en calculant les modules de compressibilité K_{app} et de cisaillement G_{app} apparents à partir des tenseurs de contraintes $\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V$ et de déformations $\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V$ mésoscopiques (section 2.1.4.2). Les champs locaux $\underline{\underline{\sigma}}$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}$ sont obtenus en sollicitant le VES en conditions CLDH et CLCH selon les chargements sphériques et déviatoriques. Pour les conditions CLDH, la valeur de déplacement u (sections 3.4.2.1 et 3.4.2.2) est $u/L = 0.0001$. Pour les conditions CLCH, la valeur de la pression t (sections 3.4.2.1 et 3.4.2.2) est $t = 1MPa$. Le module d'élasticité apparent E_{app} est calculé avec K_{app} et G_{app} (section 3.4.4.2). Le comportement thermique linéaire apparent est évalué en déterminant la conductivité thermique apparente λ_{app} selon la moyenne des conductivités axiales λ_x, λ_y et λ_z. Les conductivités thermiques axiales sont obtenues en appliquant les conditions CLF et CLG (section 3.4.3.2 et 3.4.3.1) et en calculant les vecteurs de gradient macroscopique $\underline{G} = \langle \underline{g} \rangle_V$ et de flux macroscopique $\underline{\Phi} = \langle \underline{\phi} \rangle_V$ (section 3.4.4.3).

4.2 Analyse des résultats

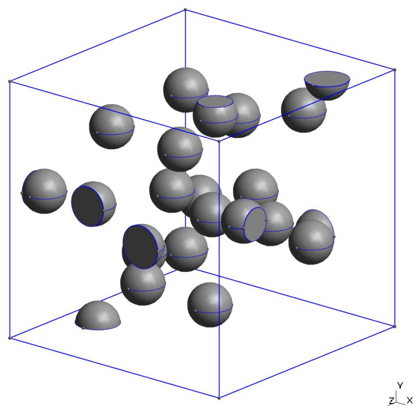
L'analyse des résultats est divisée en trois parties : l'influence du modèle géométrique (section 4.2.1), la sensibilité aux maillages (section 4.2.2) et l'étude des résultats EF et de l'homogénéisation (section 4.2.3).

4.2.1 Géométrie

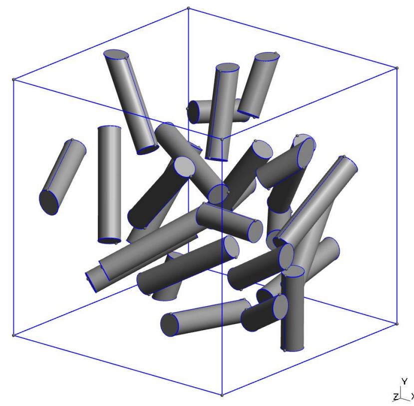
La figure 4.1 illustre un exemple du modèle BREP des microstructures à particules sphériques et cylindriques. Les fractions volumiques de particules, le nombre de particules et le volume moyen d'une particule pour chaque type d'échantillon numérique sont répertoriés à la table 4.6. Les valeurs moyennes de fractions volumiques sont très proches des fractions volumiques cibles de 5% et 10% et les faibles écarts-types indiquent que la distribution est très étroite. Ce résultat est une conséquence directe de l'utilisation de la CAO dans la génération des microstructures par la méthode RSA. Dans le cas présent, la fraction volumique réelle est calculée à chaque ajout de particule contrairement à certaines méthodes qui estiment la fraction volumique a posteriori. Le générateur RSA aidé de la CAO détermine donc précisément à quel instant il faut arrêter d'ajouter des particules. Le nombre de particules est évidemment plus élevé pour les particules S2 et C2 que pour les particules S1 et C1 puisqu'elles sont plus petites. Pour atteindre la fraction volumique cible, il faut en ajouter davantage. Une légère différence entre le nombre de particules sphériques et cylindriques est observable. Même si au départ les particules (S1,C1) et (S2,C2) ont le même volume, l'élongation des particules cylindriques fait en sorte qu'elles ont tendance à être davantage coupées par les bords du VES. Le générateur doit donc ajouter plus de particules cylindriques pour une même fraction volumique. Ce phénomène se reflète aussi sur la moyenne du volume des particules sphériques qui est légèrement supérieure aux particules cylindriques.

TABLE 4.6 – Fraction volumique de particules, nombre de particules et volume moyen d'une particule

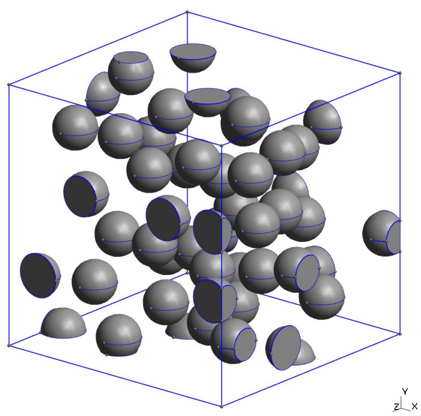
Nom	f_{vol} (%)	Nombre de particules	Volume d'une particule (10^{-3})
S1FV05	4.99 ±0.05	24 ±1	2.075 ±0.11
S1FV10	9.98 ±0.04	51 ±2	1.955 ±0.071
S2FV10	9.94 ±0.09	100 ±1	0.996 ±0.003
C1FV05	4.98 ±0.05	27 ±1	1.840 ±0.096
C1FV10	9.95 ±0.07	61 ±2	1.624 ±0.055
C2FV10	9.92 ±0.02	158 ±6	0.629 ±0.024



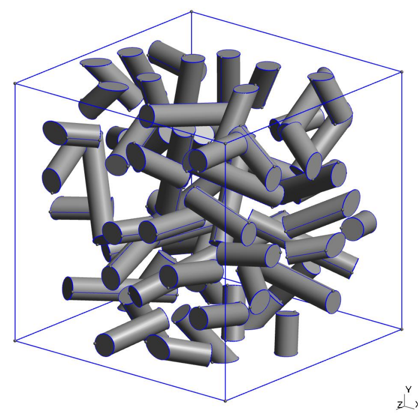
(a) S1FV05



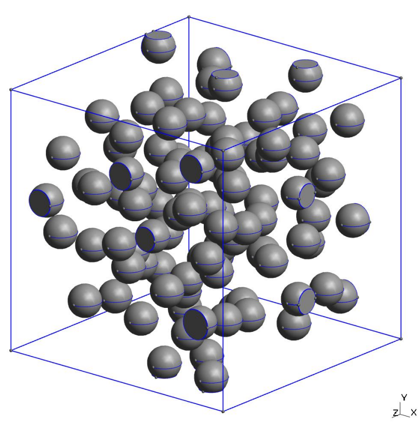
(b) C1FV05



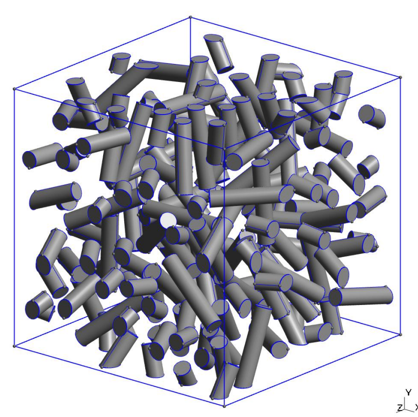
(c) S1FV10



(d) C1FV10



(e) S2FV10



(f) C2FV10

FIGURE 4.1 – Exemple de modèle BREP des microstructures à particules sphériques et cylindriques

Les centres de masse des particules positionnées dans le cube unitaire et les moments quadratiques des particules par rapport aux axes principaux x, y, z sont présentés respectivement à la table 4.7 et la table 4.8. Il est possible de constater que les centres de masse sont tous positionnés au centre du cube unitaire et les moments quadratiques sont équivalents d'un axe à l'autre. Ces résultats sont un bon indicateur de l'isotropie de la distribution des particules.

Table 4.7 – Centres de masse des particules dans le cube unitaire

Nom	x	y	z
S1FV05	0.502 ±0.040	0.501 ±0.037	0.500 ±0.035
S1FV10	0.501 ±0.017	0.499 ±0.018	0.502 ±0.019
S2FV10	0.502 ±0.010	0.499 ±0.010	0.500 ±0.012
C1FV05	0.506 ±0.026	0.498 ±0.025	0.501 ±0.028
C1FV10	0.499 ±0.014	0.498 ±0.012	0.499 ±0.012
C2FV10	0.505 ±0.010	0.507 ±0.008	0.498 ±0.008

Table 4.8 – Moments quadratiques des particules par rapport aux axes principaux x, y, z

Nom	x	y	z
S1FV05	0.0251 ±0.0020	0.0250 ±0.0018	0.0249 ±0.0018
S1FV10	0.0501 ±0.0017	0.0499 ±0.0018	0.0501 ±0.0019
S2FV10	0.0498 ±0.0012	0.0496 ±0.0009	0.0497 ±0.0012
C1FV05	0.0252 ±0.0013	0.0248 ±0.0013	0.0250 ±0.0015
C1FV10	0.0497 ±0.0014	0.0496 ±0.0011	0.0497 ±0.0011
C2FV10	0.0501 ±0.0010	0.0503 ±0.0007	0.0495 ±0.0008

Les tenseurs d'orientation des particules cylindriques sont représentés aux tables 4.9, 4.10 et 4.11. Les trois tenseurs sont très proches du tenseur isotrope ce qui indique que les distributions d'orientations sont isotropes. Les écarts-types sur les composantes des tenseurs sont faibles ce qui signifie que la distribution d'orientations de chacun des VES est proche de l'isotropie.

Table 4.9 – Tenseur d'orientations de C1FV05

$$\begin{bmatrix} 0.330 \pm 0.062 & -0.004 \pm 0.045 & -0.002 \pm 0.049 \\ -0.004 \pm 0.045 & 0.338 \pm 0.064 & -0.004 \pm 0.054 \\ -0.002 \pm 0.049 & -0.004 \pm 0.054 & 0.332 \pm 0.062 \end{bmatrix}$$

Table 4.10 – Tenseur d'orientations de C1FV10

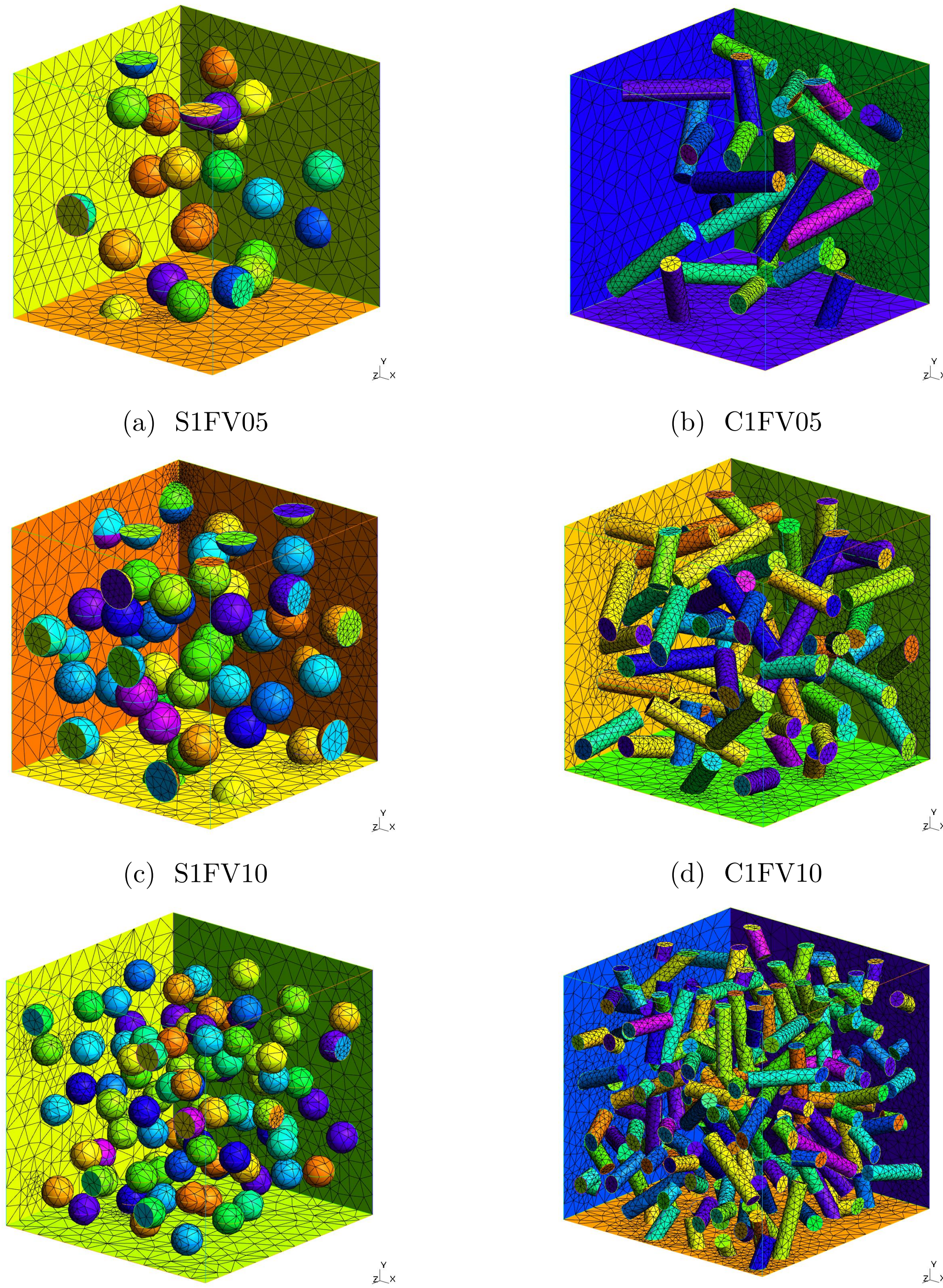
$$\begin{bmatrix} 0.324 \pm 0.044 & -0.002 \pm 0.037 & 0.000 \pm 0.036 \\ -0.002 \pm 0.037 & 0.333 \pm 0.044 & 0.009 \pm 0.039 \\ 0.000 \pm 0.036 & 0.009 \pm 0.039 & 0.343 \pm 0.035 \end{bmatrix}$$

Table 4.11 – Tenseur d'orientations de C2FV10

$$\begin{bmatrix} 0.349 \pm 0.022 & 0.007 \pm 0.017 & 0.002 \pm 0.026 \\ 0.007 \pm 0.017 & 0.322 \pm 0.019 & -0.003 \pm 0.016 \\ 0.002 \pm 0.026 & -0.003 \pm 0.016 & 0.329 \pm 0.023 \end{bmatrix}$$

4.2.2 Maillage

Les VES de chaque type d'échantillon sont maillés en éléments linéaires ou quadratiques. La figure 4.2 illustre le maillage quadratique des faces de chaque type d'échantillon. La relocalisation des nœuds du maillage quadratique est observable par l'absence de l'effet de pavage du maillage. La figure 4.3 illustre cet effet de pavage du maillage linéaire de particules cylindriques. Cet effet produit une différence sur les fractions volumiques répertoriées à la table 4.12.

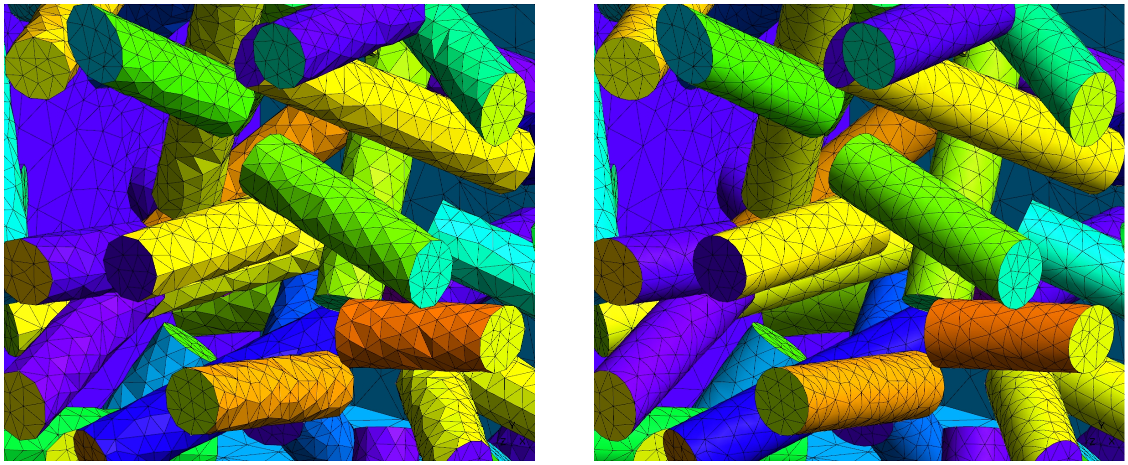


(a) S1FV05 (b) C1FV05

(c) S1FV10 (d) C1FV10

(e) S2FV10 (f) C2FV10

FIGURE 4.2 – Exemple de maillage quadratique des microstructures à particules sphériques et cylindriques



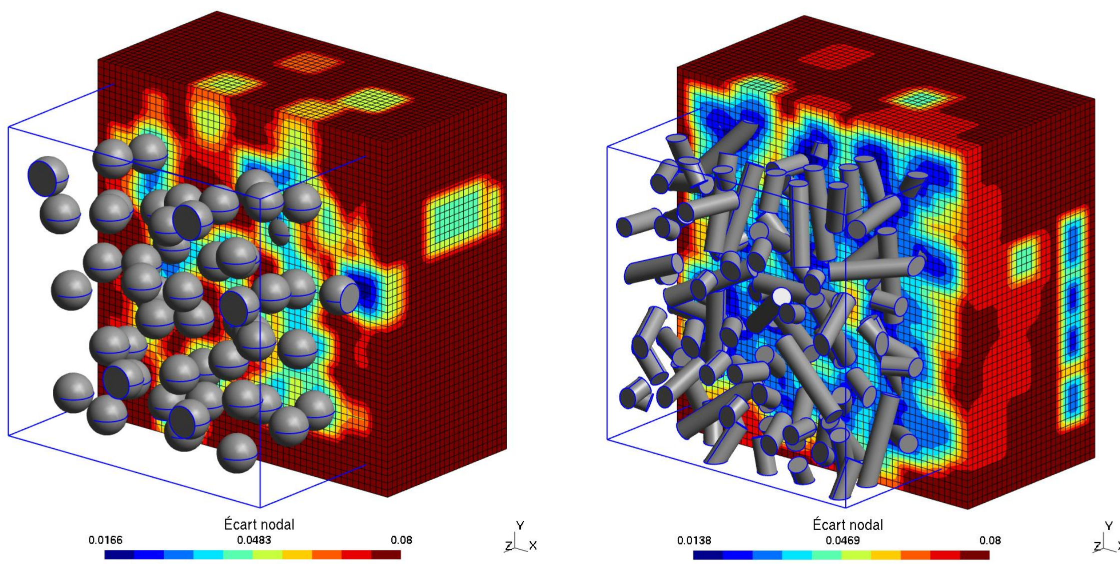
(a) (b)

Figure 4.3 – Illustration de l'effet de pavage du maillage linéaire. a) Maillage linéaire. b) Maillage quadratique

Les fractions volumiques des maillages linéaires sont inférieures à celles des maillages quadratiques dues à l'effet de pavage. Ainsi, la relocalisation des nœuds milieux des éléments quadratiques permet d'atteindre des fractions volumiques quasi identiques aux fractions volumiques des modèles géométriques. L'utilisation des outils intégrés de CAO et maillage permet donc d'améliorer la représentativité du modèle géométrique. Le nombre d'éléments du maillage EF met aussi en évidence l'intérêt d'utiliser l'approche intégrée. Les résultats de la table 4.12 montrent que plus la fraction volumique augmente, plus le nombre d'éléments est grand. La tendance est à l'inverse avec la taille des particules où plus la taille est petite plus le nombre d'éléments augmente. Ce phénomène est une conséquence directe de l'utilisation d'une carte de taille qui prend en compte la distance entre deux entités topologiques. En effet, plus il y a de particules dans le VES, plus elles seront rapprochées les unes des autres et donc plus la taille des éléments entre deux particules doit être petite pour respecter le nombre minimal d'éléments. Sans carte de taille, l'écart nodal choisi devrait être petit partout dans le VES afin de satisfaire le nombre d'éléments minimal entre les deux entités topologiques les plus proches. Cela aurait pour effet de faire augmenter significativement le nombre d'éléments et alourdirait donc la simulation. La carte de taille permet aussi de contrôler l'écart nodal à l'interface particule/matrice E_{inter}. Comme mentionné dans le plan d'expériences (section 4.1.3) l'écart nodal est défini plus petit pour les particules cylindriques comparativement aux particules sphériques afin de tenir compte de la courbure plus forte. De plus, la distance minimale entre les particules est fixée plus basse pour les particules cylindriques que pour celles sphériques ce qui a pour effet de réduire l'écart nodal. Cela explique pourquoi le nombre d'éléments est supérieur pour les particules cylindriques comparativement aux particules sphériques. La figure 4.4 illustre une coupe de la carte de taille pour un VES des configurations S2FV10 et C2FV10.

Table 4.12 – Statistiques sur les maillages

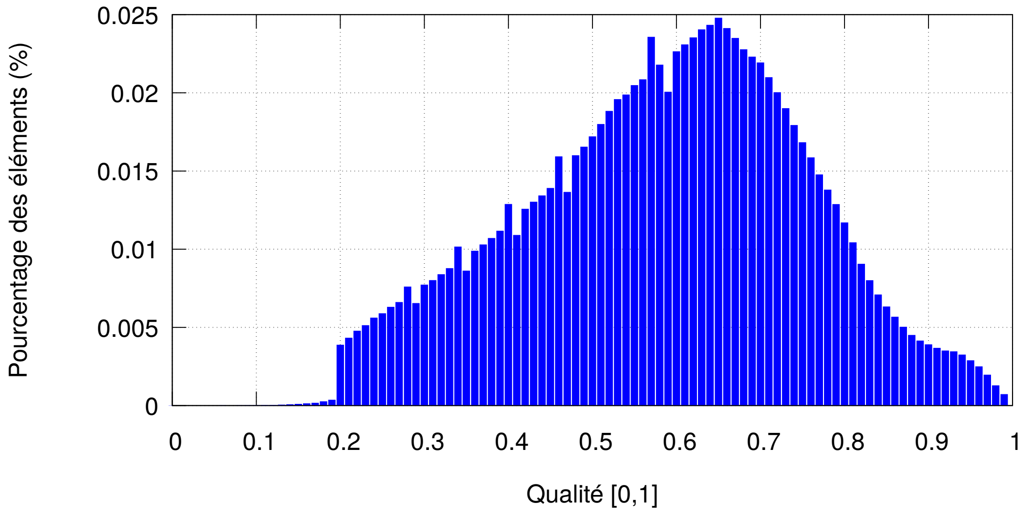
Nom	$f_{vol}^{lin.}(\%)$	$f_{vol}^{quad.}(\%)$	Nombre d'éléments	$\mathcal{Q}_K$
S1FV5	$4,36 \pm 0,05$	$4,91 \pm 0,05$	31960 ± 1384	$0,60 \pm 0,002$
S1FV10	$8,84 \pm 0,06$	$9,88 \pm 0,05$	55160 ± 1828	$0,59 \pm 0,002$
S2FV10	$8,27 \pm 0,08$	$9,70 \pm 0,12$	91023 ± 2110	$0,59 \pm 0,001$
C1FV5	$4,68 \pm 0,05$	$4,97 \pm 0,06$	116728 ± 2101	$0,59 \pm 0,001$
C1FV10	$9,36 \pm 0,07$	$9,94 \pm 0,07$	213322 ± 2935	$0,60 \pm 0,001$
C2FV10	$9,05 \pm 0,03$	$9,88 \pm 0,02$	344720 ± 3390	$0,60 \pm 0,001$



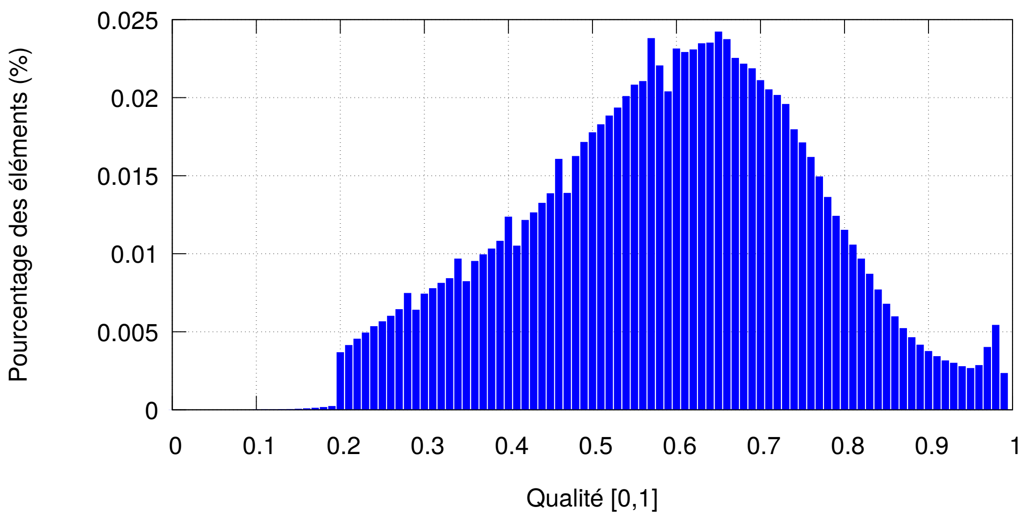
(a) (b)

Figure 4.4 – Illustration des cartes de tailles. a) S2FV10. b) C2FV10

La qualité des éléments $\mathcal{Q}_K$ reportée à la table 4.12 est calculée selon l'équation 2.54 à partir des tétraèdres linéaires. Malgré les variations d'écart nodal, la qualité moyenne est élevée pour chaque formulation. Les distributions de $\mathcal{Q}_K$ pour S1FV10 et C1FV10 sont illustrées a la figure 4.5. La distribution de $\mathcal{Q}_K$ est centrée sur la valeur moyenne $(0, 60)$. Le pourcentage d'éléments (en dessous de 0.2) présente un saut à 0.2. Ce saut est occasionné par le mailleur qui, lorsque c'est possible, détruit les éléments dont la qualité est inférieure à 0.2 et remaille les régions concernées.



(a)



(b)

FIGURE 4.5 – Distribution de la qualité des éléments. a) S1FV10. b) C1FV10

4.2.3 Résultats EF et homogénéisation

4.2.3.1 Champs mécaniques et thermiques

Les champs locaux ε_{xx} et σ_{xx} des VES de type S1FV10 et S1FV10 avec les maillages quadratiques sollicités en CLDH et CLCH selon un chargement purement sphérique sont illustrés aux figures 4.6 et 4.7. Pour des fins de visualisation, les champs calculés aux points de Gauss des éléments quadratiques sont représentés selon une valeur par élément. Aussi, les éléments utilisés pour la visualisation sont quadratiques avec des nœuds non repoussés sur les entités géométriques courbées. Il est possible de constater que la valeur de déformation ε_{xx} dans les particules est plus faible que dans la matrice ce qui est cohérent avec le fait que les particules de verre sont plus rigides que la matrice (table 4.1). Le phénomène inverse est observable au niveau de la valeur de la contrainte σ_{xx}. Des effets de bord sont clairement mis en évidence dans les illustrations de la contrainte σ_{xx} et sont aussi observables pour la déformation ε_{xx}. Par exemple, à la figure 4.6b, la contrainte σ_{xx} dans les particules est plus élevée sur le bord du VES que dans le cœur du VES.

Les moyennes volumiques des champs sont calculées pour chaque VES et sont combinées afin d'obtenir des moyennes et écarts-types sur tous les VES. L'équation 4.1 montre le tenseur des contraintes macroscopiques obtenu à partir des 100 VES C1FV10 avec un maillage quadratique $\mathcal{T}_{quad.}$ en CLDH et chargement sphérique. Ce tenseur respecte bien une forme diagonale souhaitée puisque toutes les composantes hors diagonale sont presque nulles. Les faibles écarts-types démontrent que la variation des composantes du tenseur est faible d'un VES à l'autre. L'équation 4.1 est représentée de façon simplifiée par l'équation 4.2.

$$\underline{\underline{\Sigma}}^{\mathcal{T}_{quad.}}_{CLDH_{sph.}} = \begin{bmatrix} \underset{(\pm 1.1\times10^{-2})}{1.26} & \underset{(\pm 9.0\times10^{-3})}{-1.02\times10^{-3}} & \underset{(\pm 9.7\times10^{-3})}{2.77\times10^{-3}} \\ \underset{(\pm 9.0\times10^{-3})}{-1.02\times10^{-3}} & \underset{(\pm 1.0\times10^{-2})}{1.26} & \underset{(\pm 8.5\times10^{-3})}{5.30\times10^{-4}} \\ \underset{(\pm 9.7\times10^{-3})}{2.77\times10^{-3}} & \underset{(\pm 8.5\times10^{-3})}{5.30\times10^{-4}} & \underset{(\pm 9.6\times10^{-3})}{1.26} \end{bmatrix} (MPa) \tag{4.1}$$

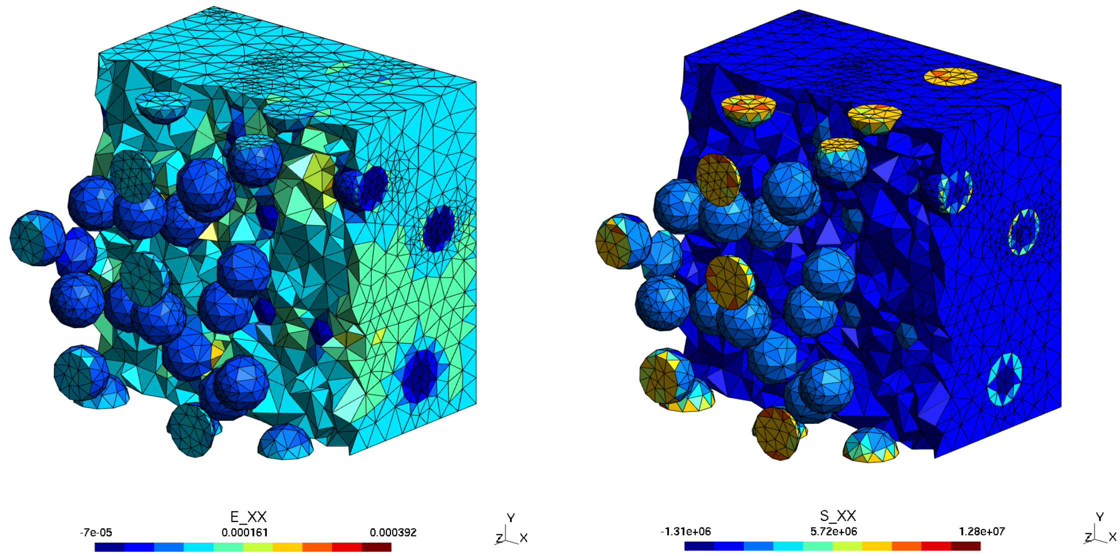
$$\underline{\underline{\Sigma}}^{\mathcal{T}_{quad.}}_{CLDH_{sph.}} \approx \begin{bmatrix} 1.26 & 0 & 0 \\ 0 & 1.26 & 0 \\ 0 & 0 & 1.26 \end{bmatrix} (MPa) \tag{4.2}$$

L'équation 4.3 montre le tenseur des contraintes macroscopiques obtenu à partir des 100 VES C1FV10 avec un maillage quadratique $\mathcal{T}_{quad.}$ en CLDH et chargement déviatorique. L'équation 4.3 est représentée de façon simplifiée par l'équation 4.4. Le tenseur respecte bien la configuration purement déviatorique souhaitée puisque les composantes diagonales sont presque nulles.

$$\underset{\equiv}{\Sigma}^{\mathcal{T}_{quad.}}_{CLDH_{dev.}} = \begin{bmatrix} \underset{(\pm 1.3\times10^{-2})}{1.51\times10^{-4}} & \underset{(\pm 6.5\times10^{-3})}{0.37} & \underset{(\pm 7.0\times10^{-3})}{0.37} \\ \underset{(\pm 6.5\times10^{-3})}{0.37} & \underset{(\pm 1.3\times10^{-2})}{1.27\times10^{-3}} & \underset{(\pm 6.9\times10^{-3})}{0.37} \\ \underset{(\pm 7.0\times10^{-3})}{0.37} & \underset{(\pm 6.9\times10^{-3})}{0.37} & \underset{(\pm 1.4\times10^{-2})}{0.31\times10^{-3}} \end{bmatrix} (MPa) \tag{4.3}$$

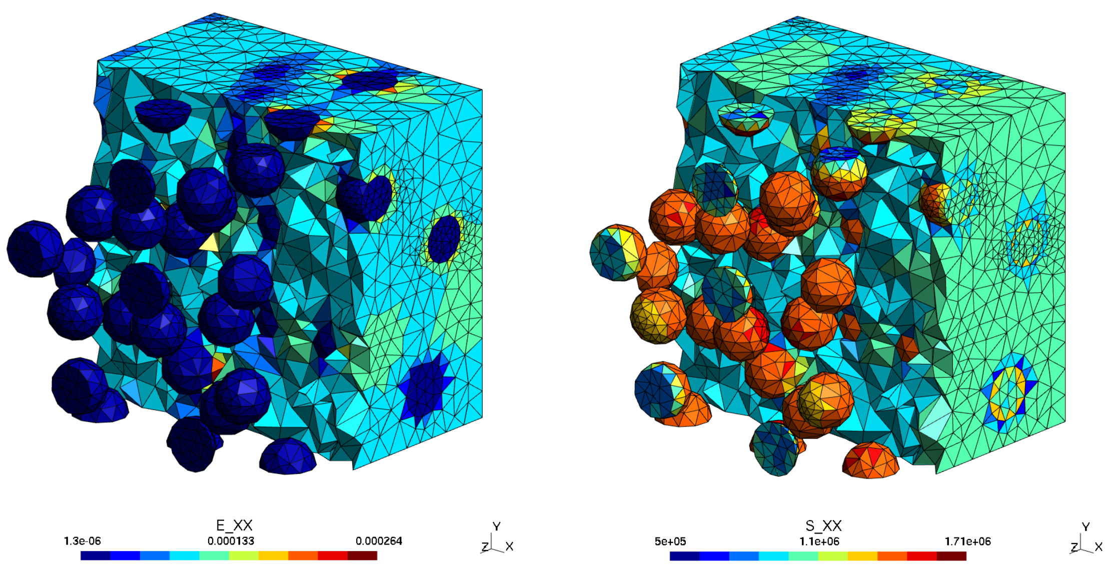
$$\underset{\equiv}{\Sigma}^{\mathcal{T}_{quad.}}_{CLDH_{dev.}} \approx \begin{bmatrix} 0 & 0.37 & 0.37 \\ 0.37 & 0 & 0.37 \\ 0.37 & 0.37 & 0 \end{bmatrix} (MPa) \tag{4.4}$$

La forme des tenseurs des déformations macroscopiques en CLCH est similaire aux deux tenseurs précédents pour les chargements sphériques et déviatoriques.



(a) Champ ε_{xx} (b) Champ σ_{xx}

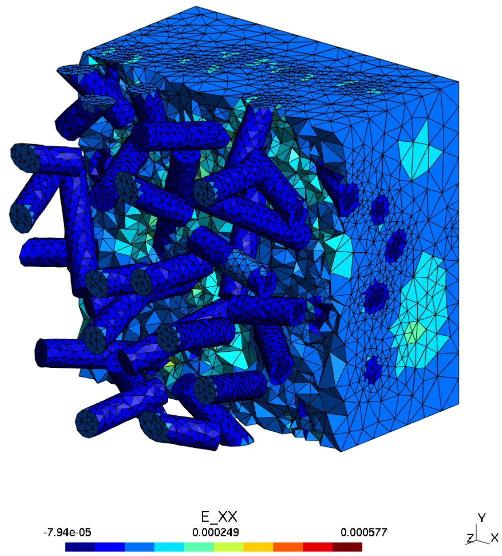
CLDH



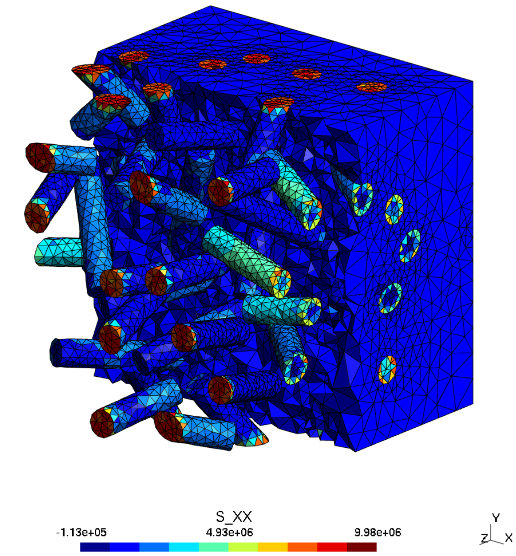
(c) Champ ε_{xx} (d) Champ σ_{xx}

CLCH

FIGURE 4.6 – Illustration des champs ε_{xx} et σ_{xx} dans un VES de type S1FV10 pour un chargement purement sphérique en CLDH et CLCH

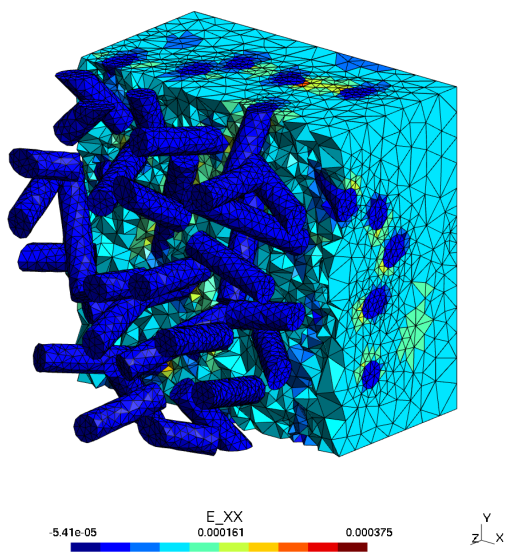


(a) Champ ε_{xx}

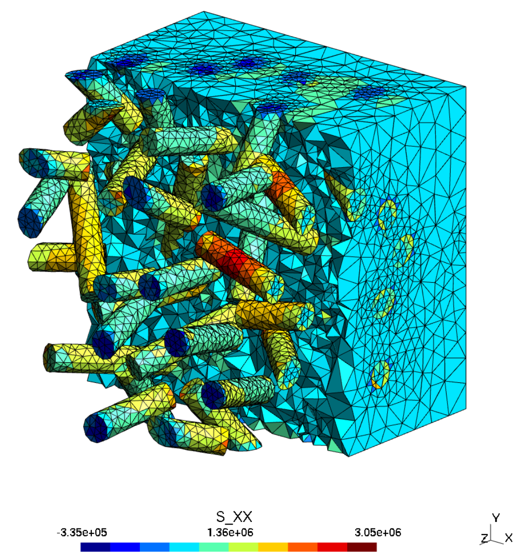


(b) Champ σ_{xx}

CLDH



(c) Champ ε_{xx}



(d) Champ σ_{xx}

CLCH

FIGURE 4.7 – Illustration des champs ε_{xx} et σ_{xx} dans un VES de type C1FV10 pour un chargement purement sphérique en CLDH et CLCH

Les champs de température T et de flux thermique ϕ_x des VES de type S1FV10 et S1FV10 avec les maillages quadratiques sollicités en CLGx et CLFx sont illustrés aux figures 4.8b et 4.8d. Les valeurs du flux thermique sont calculées aux points de Gauss. Pour des fins d'illustration, les valeurs de ϕ_x sont représentées aux éléments sur un maillage quadratique aux nœuds non repoussés sur les entités géométriques courbées.

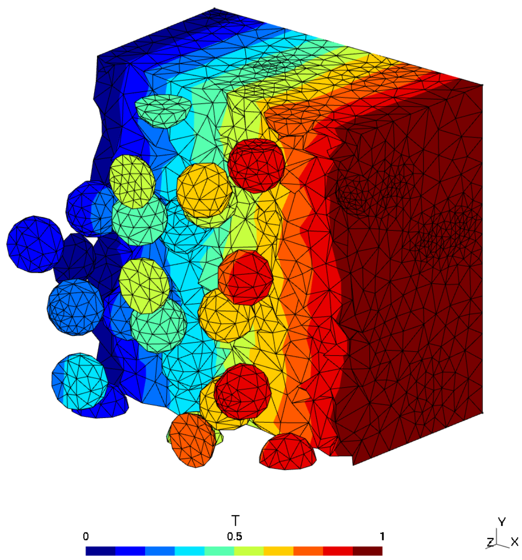
Le flux thermique est plus élevé dans les particules que dans la matrice ce qui est cohérent avec la conductivité thermique plus élevée des particules. De légers effets de bord sont observables au niveau des plans ($x = 1$) sur les figures 4.8b, 4.8d, 4.9b et 4.9d.

Les équations 4.5, 4.6 et 4.7 montrent les vecteurs flux obtenus pour les trois calculs thermiques en conditions CLG selon les axes x, y et z. Les valeurs de flux selon l'axe du gradient thermique sont très proches et les autres composantes sont presque nulles.

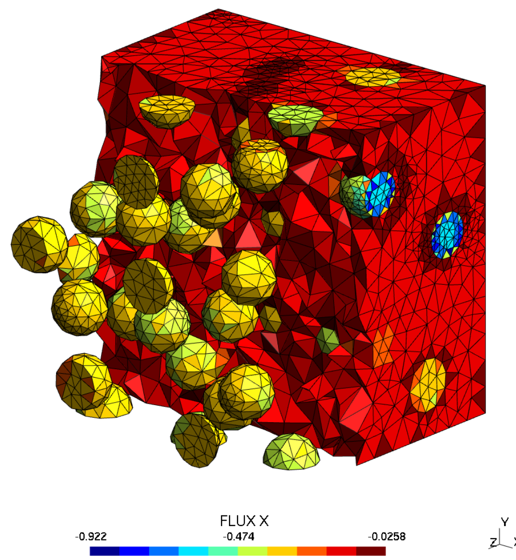
$$\underline{\Phi}^{\mathcal{T}_{quad.}}_{CLG_x} = \begin{bmatrix} -0.1821 \pm 0.0026 \\ 0.0001 \pm 0.0015 \\ -0.0002 \pm 0.0014 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} -0.1821 \\ 0.0 \\ 0.0 \end{bmatrix} \tag{4.5}$$

$$\underline{\Phi}^{\mathcal{T}_{quad.}}_{CLG_y} = \begin{bmatrix} -0.0000 \pm 0.0013 \\ -0.1828 \pm 0.0026 \\ -0.0003 \pm 0.0016 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0.0 \\ -0.1828 \\ 0.0 \end{bmatrix} \tag{4.6}$$

$$\underline{\Phi}^{\mathcal{T}_{quad.}}_{CLG_z} = \begin{bmatrix} -0.0001 \pm 0.0015 \\ -0.0003 \pm 0.0016 \\ -0.1834 \pm 0.0022 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0.0 \\ 0.0 \\ -0.1834 \end{bmatrix} \tag{4.7}$$

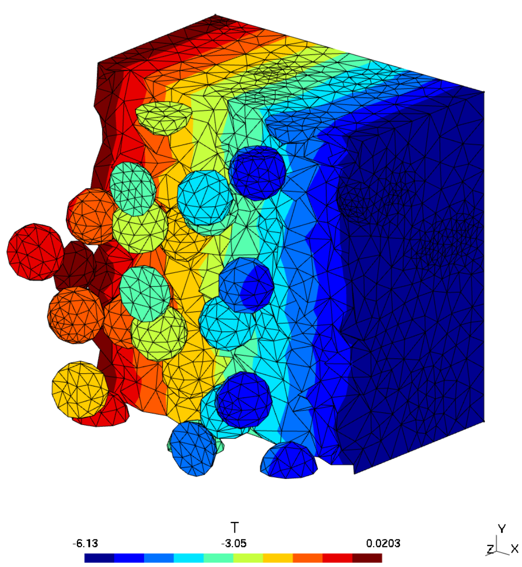


(a) Champ T

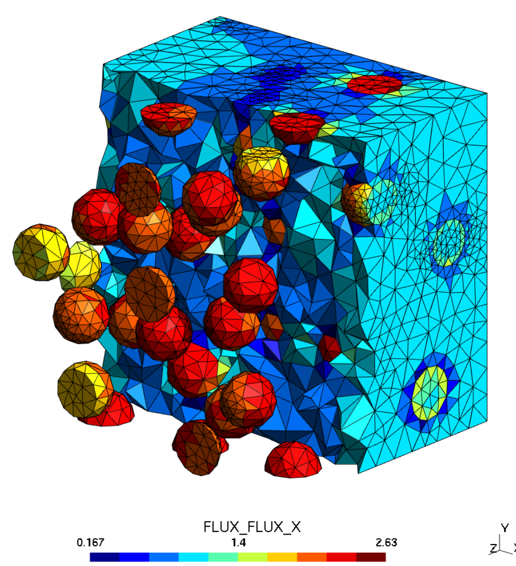


(b) Champ ϕ_x

CLG selon l'axe x



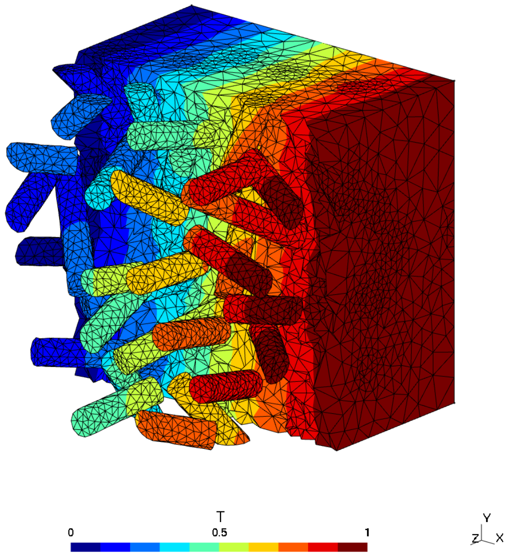
(c) Champ T



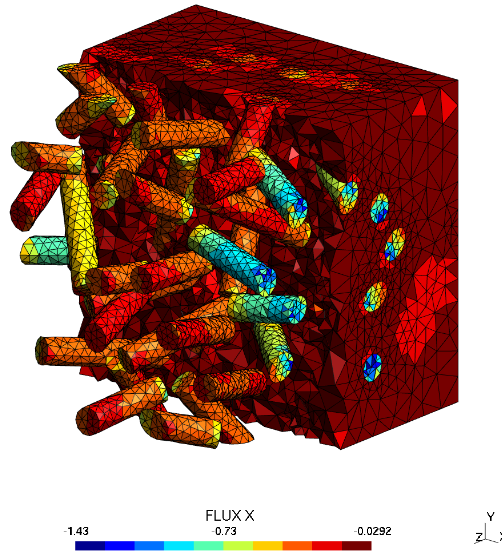
(d) Champ ϕ_x

CLF selon l'axe x

FIGURE 4.8 – Illustration des champs T ($°C$) et ϕ_x ($W.m^{-2}$) dans un VES de type S1FV10 en CLG et CLF selon l'axe x

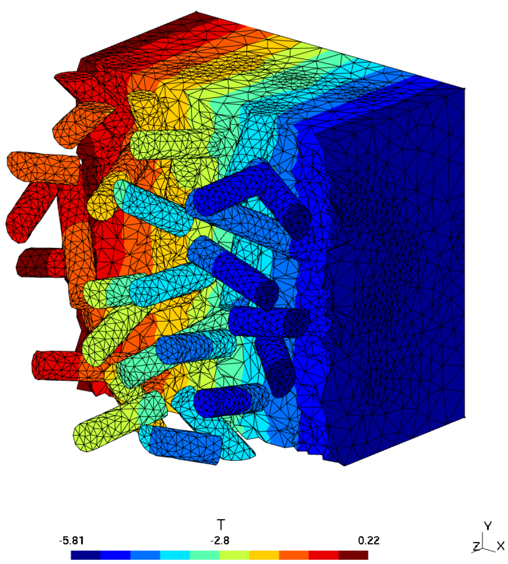


(a) Champ T

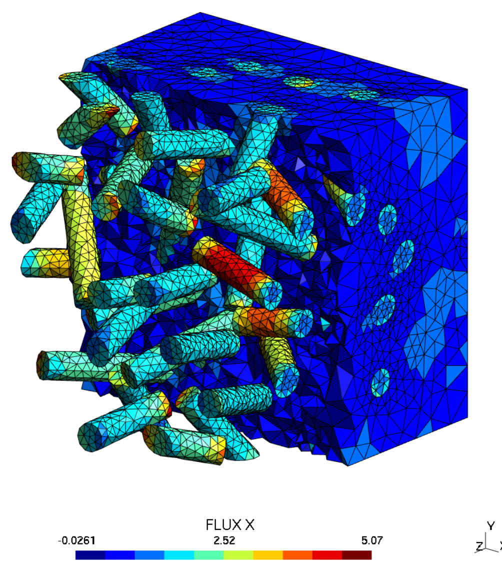


(b) Champ ϕ_x

CLG selon l'axe x



(c) Champ T



(d) Champ ϕ_x

CLF selon l'axe x

FIGURE 4.9 – Illustration des champs T ($°C$) et ϕ_x ($W.m^{-2}$) dans un VES de type C1FV10 en CLG et CLF selon l'axe x

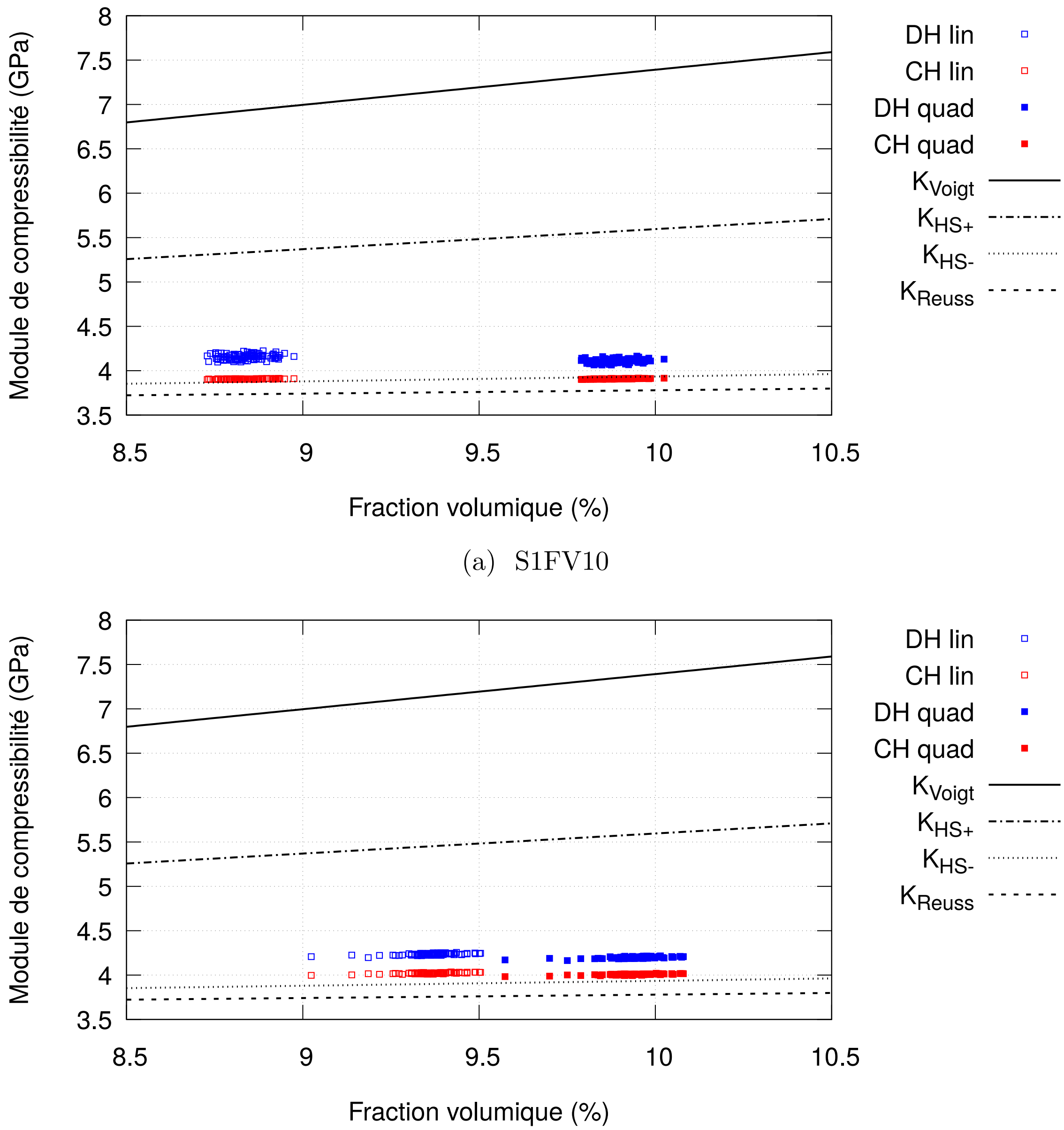
4.2.3.2 Résultats sur les propriétés homogénéisées

Le module de compressibilité apparent K_{app} est calculé à partir des tenseurs de contraintes $\underline{\underline{\Sigma}}$ et de déformations $\underline{\underline{E}}$ macroscopiques obtenus par un chargement purement sphérique en CLDH ou CLCH. Les moyennes et écart-types des K_{app} pour chaque configuration sont répertoriés à la table 4.13 avec les bornes analytiques évaluées selon les moyennes des fractions volumiques de particules. La figure 4.10 illustre la distribution des K_{app} pour les microstructures de type S1FV10 et C1FV10. Le module de cisaillement apparent G_{app} est calculé à partir de $\underline{\underline{\Sigma}}$ et $\underline{\underline{E}}$ obtenu par un chargement purement déviatorique en CLDH ou CLCH. Les résultats sont répertoriés à la table 4.14 et la distribution de G_{app} pour S1FV10 et C1FV10 est illustrée à la figure 4.11. Le module d'élasticité apparent E_{app} est calculé à partir de K_{app} et G_{app}. La table 4.15 liste les différentes valeurs de E_{app} et la figure 4.12 illustre leur distribution pour S1FV10 et C1FV10.

La conductivité apparente λ_{app} est calculée comme étant la moyenne des conductivités axiales λ_x, λ_y et λ_z. Les conductivités axiales sont calculées à partir des vecteurs de flux $\underline{\Phi}$ et de gradient de température $\underline{G}$ macroscopiques obtenus par les chargements CLG et CLH. La table 4.16 liste les valeurs de λ_{app} et la figure 4.13 illustre leur distribution pour S1FV10 et C1FV10.

TABLE 4.13 – Module de compressibilité apparent K_{app} (GPa)

Nom	$\mathcal{T}$	$f_{vol}(\%)$	Résultats numériques			Bornes analytiques			
			CLDH	CLCH	$\Delta(\%)$	Reuss	HS^-	HS^+	Voigt
S1FV05	*lin.*	$4,36 \pm 0,05$	3.753 ± 0.024	3.658 ± 0.003	2.54	3.574	3.639	4.348	5.158
	quad.	$4,91 \pm 0,05$	3.735 ± 0.019	**3.659** ± 0.003	2.04	3.593	**3.666**	4.467	5.375
S1FV10	*lin.*	$8,84 \pm 0,06$	4.156 ± 0.030	3.906 ± 0.003	6.02	3.735	3.871	5.333	6.932
	quad.	$9,88 \pm 0,05$	4.109 ± 0.024	**3.908** ± 0.003	4.88	3.774	**3.927**	5.568	7.344
S2FV10	*lin.*	$8,27 \pm 0,08$	3.992 ± 0.009	3.900 ± 0.005	2.30	3.714	3.840	5.205	6.706
	quad.	$9,70 \pm 0,12$	3.979 ± 0.008	**3.910** ± 0.007	1.74	3.767	**3.917**	5.527	7.272
C1FV05	*lin.*	$4,68 \pm 0,05$	3.808 ± 0.010	3.722 ± 0.005	2.26	3.585	3.655	4.417	5.284
	quad.	$4,97 \pm 0,06$	3.792 ± 0.009	3.714 ± 0.005	2.06	3.595	3.669	4.480	5.399
C1FV10	*lin.*	$9,36 \pm 0,07$	4.233 ± 0.010	4.021 ± 0.006	5.01	3.754	3.899	5.450	7.138
	quad.	$9,94 \pm 0,07$	4.197 ± 0.009	4.006 ± 0.006	4.54	3.776	3.931	5.581	7.368
C2FV10	*lin.*	$9,05 \pm 0,03$	4.216 ± 0.007	4.033 ± 0.005	4.34	3.743	3.882	5.380	7.015
	quad.	$9,88 \pm 0,02$	4.177 ± 0.006	4.018 ± 0.005	3.81	3.774	3.927	5.568	7.344



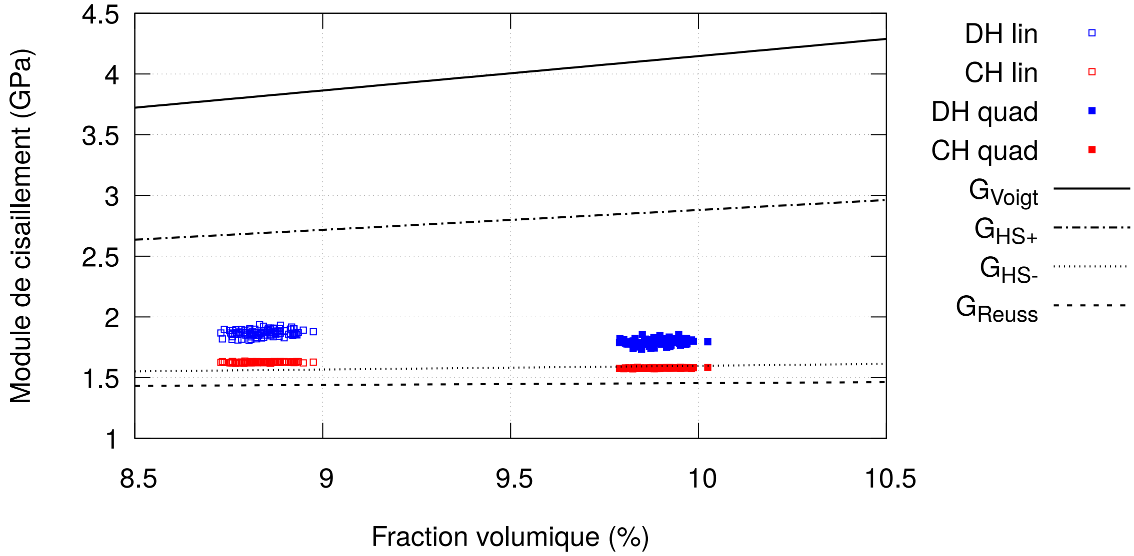
(a) S1FV10

(b) C1FV10

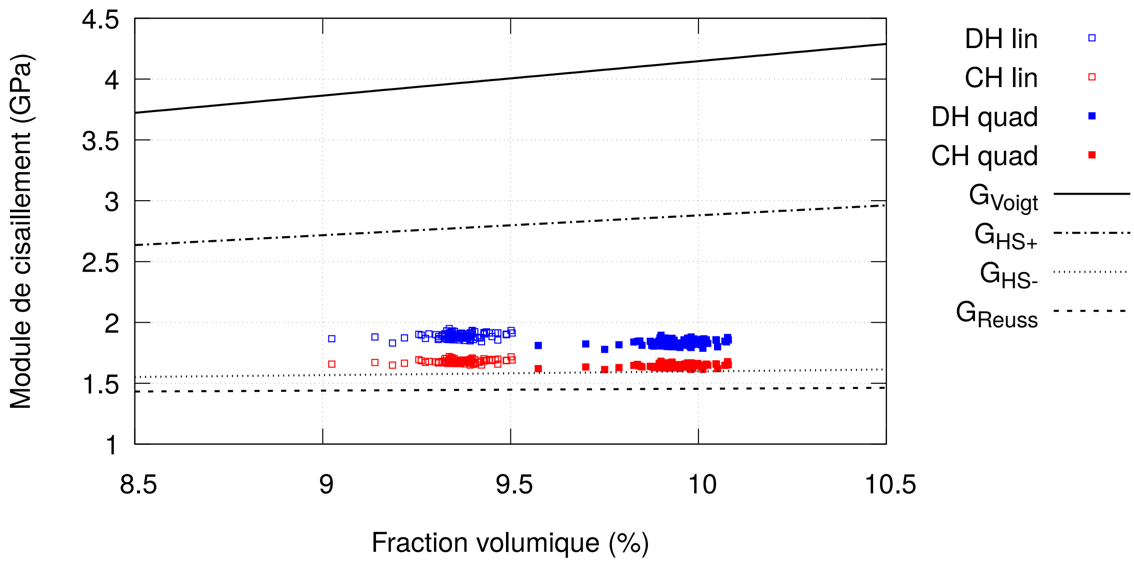
FIGURE 4.10 – Illustration des modules de compressibilité apparents K_{app}. a) S1FV10. b) C1FV10.

TABLE 4.14 – Module de cisaillement apparent G_{app} (GPa)

Nom	$\mathcal{T}$	$f_{vol}(\%)$	Résultats numériques			Bornes analytiques			
			CLDH	CLCH	$\Delta(\%)$	Reuss	HS^-	HS^+	Voigt
S1FV05	*lin.*	$4,36 \pm 0,05$	1.560 ±0.021	1.464 ±0.003	6.13	1.372	1.431	1.979	2.550
	quad.	$4,91 \pm 0,05$	1.523 ±0.019	**1.440** ±0.002	5.45	1.380	**1.447**	2.064	2.706
S1FV10	*lin.*	$8,84 \pm 0,06$	1.868 ±0.027	1.626 ±0.004	12.95	1.437	1.561	2.690	3.818
	quad.	$9,88 \pm 0,05$	1.792 ±0.025	**1.578** ±0.003	11.92	1.452	**1.593**	2.860	4.113
S2FV10	*lin.*	$8,27 \pm 0,08$	1.753 ±0.010	1.636 ±0.004	6.63	1.428	1.544	2.598	3.657
	quad.	$9,70 \pm 0,12$	1.681 ±0.010	**1.584** ±0.005	5.77	1.450	**1.588**	2.830	4.062
C1FV05	*lin.*	$4,68 \pm 0,05$	1.575 ±0.017	1.492 ±0.011	5.28	1.377	1.440	2.029	2.640
	quad.	$4,97 \pm 0,06$	1.549 ±0.016	1.474 ±0.010	4.85	1.381	1.449	2.074	2.723
C1FV10	*lin.*	$9,36 \pm 0,07$	1.889 ±0.023	1.679 ±0.015	11.15	1.445	1.577	2.775	3.966
	quad.	$9,94 \pm 0,07$	1.833 ±0.023	1.641 ±0.014	10.45	1.453	1.595	2.870	4.130
C2FV10	*lin.*	$9,05 \pm 0,03$	1.877 ±0.017	1.694 ±0.007	9.77	1.440	1.568	2.724	3.878
	quad.	$9,88 \pm 0,02$	1.813 ±0.016	1.649 ±0.007	9.05	1.452	1.593	2.860	4.113



(a) S1FV10

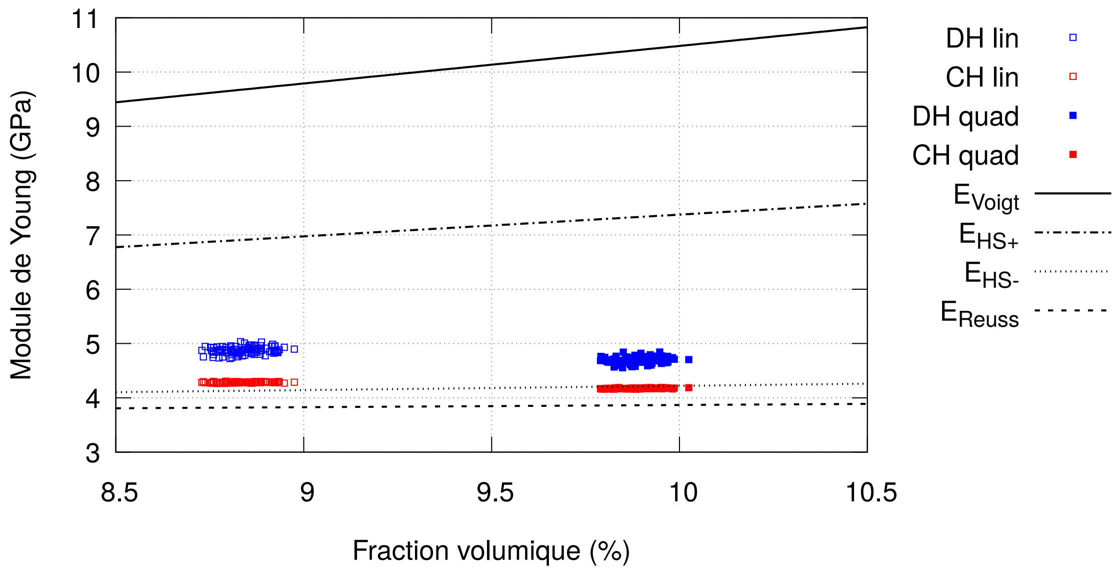


(b) C1FV10

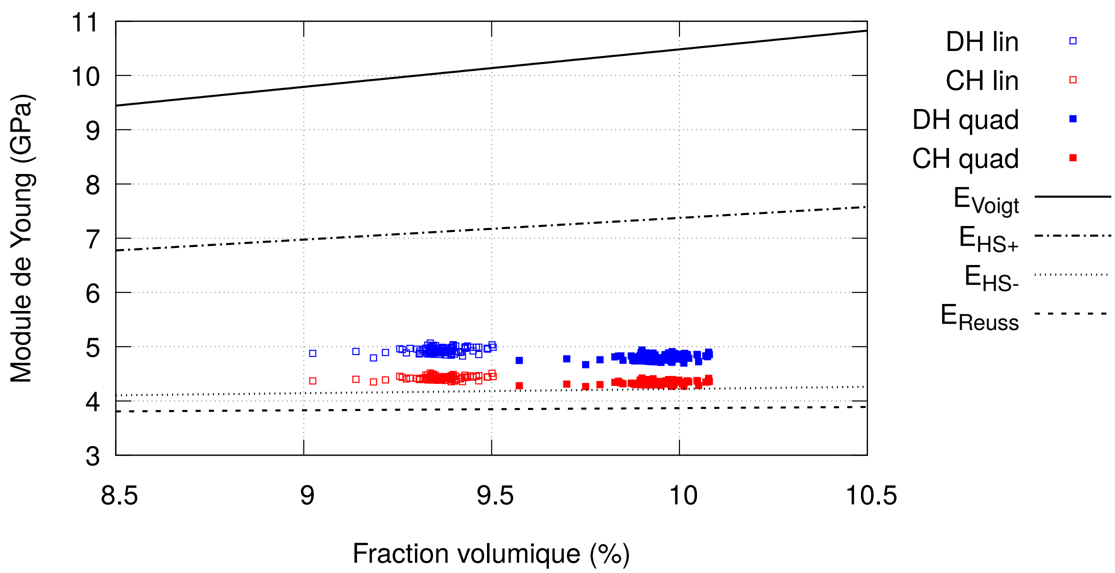
FIGURE 4.11 – Illustration des modules de cisaillement apparents G_{app}. a) S1FV10. b) C1FV10.

TABLE 4.15 – Module d'élasticité apparent E_{app} (GPa)

Nom	$\mathcal{T}$	$f_{vol}(\%)$	Résultats numériques			Bornes analytiques			
			CLDH	CLCH	$\Delta(\%)$	Reuss	HS^-	HS^+	Voigt
S1FV05	*lin.*	$4,36 \pm 0,05$	4.111 ±0.051	3.876 ±0.008	5.71	3.651	3.797	5.155	6.568
	quad.	$4,91 \pm 0,05$	4.023 ±0.045	**3.819** ±0.006	5.05	3.671	**3.837**	5.367	6.951
S1FV10	*lin.*	$8,84 \pm 0,06$	4.874 ±0.065	4.284 ±0.009	12.10	3.821	4.130	6.910	9.679
	quad.	$9,88 \pm 0,05$	4.694 ±0.060	**4.173** ±0.007	11.09	3.863	**4.211**	7.326	10.398
S2FV10	*lin.*	$8,27 \pm 0,08$	4.586 ±0.025	4.307 ±0.009	6.10	3.798	4.086	6.683	9.284
	quad.	$9,70 \pm 0,12$	4.420 ±0.025	**4.186** ±0.011	5.29	3.855	**4.197**	7.254	10.274
C1FV05	*lin.*	$4,68 \pm 0,05$	4.153 ±0.040	3.949 ±0.025	4.92	3.663	3.820	5.278	6.791
	quad.	$4,97 \pm 0,06$	4.090 ±0.038	3.905 ±0.024	4.53	3.673	3.841	5.390	6.993
C1FV10	*lin.*	$9,36 \pm 0,07$	4.934 ±0.053	4.421 ±0.034	10.40	3.842	4.170	7.117	10.039
	quad.	$9,94 \pm 0,07$	4.799 ±0.052	4.332 ±0.033	9.74	3.865	4.216	7.350	10.440
C2FV10	*lin.*	$9,05 \pm 0,03$	4.904 ±0.039	4.458 ±0.017	9.11	3.829	4.146	6.993	9.824
	quad.	$9,88 \pm 0,02$	4.752 ±0.037	4.352 ±0.017	8.42	3.863	4.211	7.326	10.398



(a) S1FV10

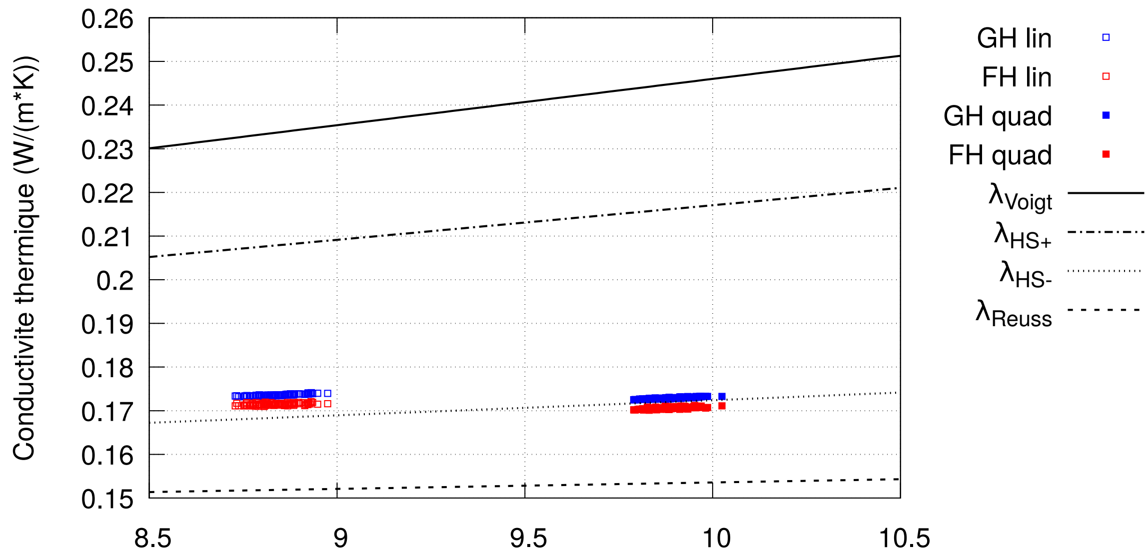


(b) C1FV10

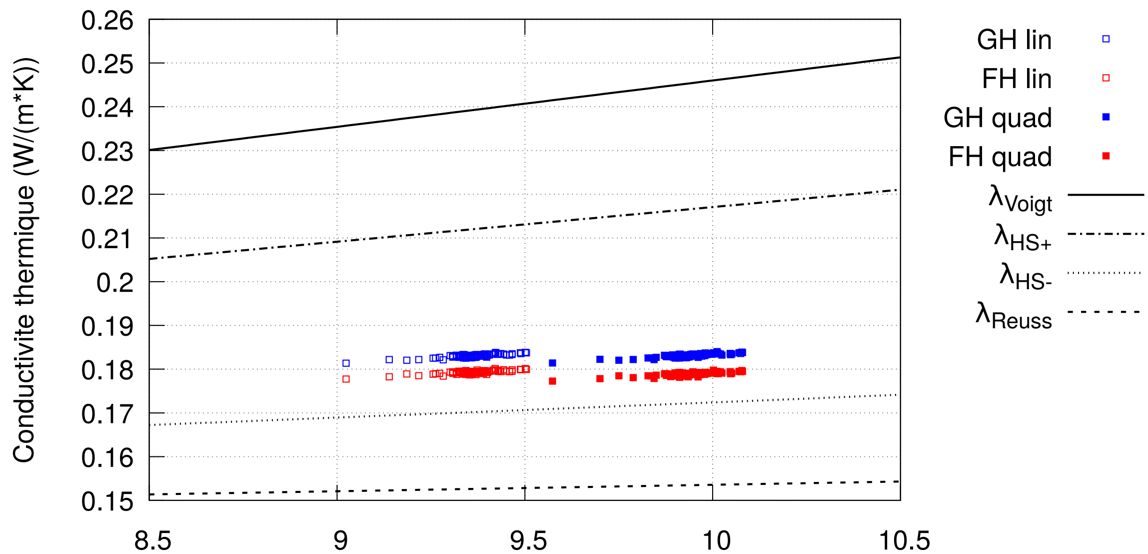
FIGURE 4.12 – Illustration des modules d'élasticité apparents E_{app}. a) S1FV10. b) C1FV10.

TABLE 4.16 – Conductivité thermique apparente λ_{app} $(Wm^{-1}K^{-1})$

Nom	$\mathcal{T}$	$f_{vol}(\%)$	Résultats numériques			Bornes analytiques			
			CLDH	CLCH	$\Delta(\%)$	Reuss	HS^-	HS^+	Voigt
S1FV05	*lin.*	$4,36 \pm 0,05$	0.1562 ±0.0002	0.1552 ±0.0002	0.59	0.1456	0.1535	0.1730	0.1862
	quad.	$4,91 \pm 0,05$	0.1557 ±0.0002	**0.1547** ±0.0002	0.61	0.1463	**0.1553**	0.1772	0.1920
S1FV10	*lin.*	$8,84 \pm 0,06$	0.1736 ±0.0002	0.1715 ±0.0002	1.21	0.1518	0.1683	0.2078	0.2337
	quad.	$9,88 \pm 0,05$	0.1729 ±0.0002	**0.1706** ±0.0002	1.31	0.1533	**0.1719**	0.2161	0.2447
S2FV10	*lin.*	$8,27 \pm 0,08$	0.1727 ±0.0003	0.1713 ±0.0003	0.78	0.1510	0.1664	0.2033	0.2276
	quad.	$9,70 \pm 0,12$	0.1723 ±0.0004	**0.1708** ±0.0004	0.89	0.1531	**0.1713**	0.2146	0.2428
C1FV05	*lin.*	$4,68 \pm 0,05$	0.1611 ±0.0003	0.1594 ±0.0003	1.03	0.1460	0.1545	0.1754	0.1896
	quad.	$4,97 \pm 0,06$	0.1611 ±0.0003	0.1592 ±0.0003	1.13	0.1464	0.1555	0.1777	0.1926
C1FV10	*lin.*	$9,36 \pm 0,07$	0.1831 ±0.0004	0.1793 ±0.0004	2.05	0.1526	0.1701	0.2119	0.2392
	quad.	$9,94 \pm 0,07$	0.1831 ±0.0004	0.1789 ±0.0004	2.33	0.1534	0.1721	0.2165	0.2453
C2FV10	*lin.*	$9,05 \pm 0,03$	0.1820 ±0.0002	0.1794 ±0.0002	1.42	0.1521	0.1691	0.2095	0.2359
	quad.	$9,88 \pm 0,02$	0.1825 ±0.0002	0.1792 ±0.0003	1.79	0.1533	0.1719	0.2161	0.2447



(a) S1FV10



(b) C1FV10

FIGURE 4.13 – Illustration des conductivités thermiques apparentes λ_{app}. a) S1FV10. b) C1FV10.

Influence de la fraction volumique de particules

En comparant les valeurs moyennes des modules d'un type d'échantillon à l'autre, il est possible de constater que les modules augmentent en fonction de la fraction volumique de particules. Par exemple, le module de compressibilité K_{app} pour un maillage linéaire en CLDH, passe de 3.753 GPa pour S1FV05 à 4.156 GPa pour S1FV10. Évidemment, puisque les particules de verre sont plus rigides que la matrice, il est normal qu'une microstructure plus chargée en particules, soit plus rigide. Cette constatation est valide pour K_{app}, G_{app}, E_{app} et λ_{app} et pour tous les types d'échantillons.

Influence de la forme des particules

La forme géométrique des particules influence la valeur des propriétés homogénéisées. Les particules cylindriques, étant plus allongées ($L/D = 5$) que les particules sphériques, transfèrent davantage les charges ainsi que la chaleur d'une particule à l'autre. Les VES chargés de particules cylindriques sont donc plus rigides et conductrices que les VES chargés de particules sphériques.

Influence du degré du maillage

Le degré du maillage influence grandement les modules apparents. D'abord, la fraction volumique de particules est significativement plus grande avec les éléments quadratiques via la relocalisation des nœuds milieux. La différence de fraction volumique est clairement observable dans les figures illustrant les distributions (figures 4.10, 4.11, 4.12, 4.13). L'augmentation de la fraction volumique de particules dans les maillages quadratiques devrait s'accompagner d'une hausse des différents modules comparés aux modules avec les maillages linéaires. Cependant, c'est plutôt l'inverse qui est observé dans la plupart des cas avec une baisse des modules de $\mathcal{T}^{lin.}$ à $\mathcal{T}^{quad.}$. La diminution est attribuable au fait que les tétraèdres linéaires tendent à surestimer la rigidité d'une structure. Cette surestimation est amoindrie par l'utilisation des tétraèdres quadratiques qui ont un degré d'interpolation plus élevé.

Influence du type de CL

La comparaison entre les résultats obtenus en CLDH et CLCH (CLG et CLF) révèle que le type de conditions aux limites influence la valeur des modules. Les modules obtenus en CLDH (CLF) sont légèrement supérieurs aux modules obtenus en CLCH (CLF). Cet écart relatif $\Delta(\%)$ est représenté dans les quatre tableaux de résultats (tables 4.13, 4.14, 4.15, 4.16). La présence d'effets de bord explique cette différence. En effet, les conditions aux limites sont appliquées sur un contour qui est hétérogène. Cette hétérogénéité induit des perturbations importantes dans les champs locaux avoisinant les interfaces particules/matrices aux bords du VES. Par exemple, aux figures 4.7b et 4.7d les champs $\underline{\underline{\sigma}}$ des éléments au bord du VES appartenant aux particules sont surévalués en CLDH et sous-évalués en CLCH. Cet écart est plus faible avec les $\mathcal{T}^{quad.}$ compte tenu du plus grand nombre de nœuds dans les éléments quadratiques qui fait en sorte que les perturbations locales sont davantage localisées. La taille du VES influence aussi $\Delta(\%)$ en diminuant sa valeur lorsque le VES contient plus de petites particules pour une même fraction volumique. Cette diminution est attribuable au fait que plus la taille du VES est grande, plus la discrétisation est fine, et donc, plus le rapport entre les champs aux bords du VES et les champs en volume est petit.

Comparaison avec les bornes analytiques

Tous les résultats numériques calculés avec $\mathcal{T}^{lin.}$ sont situés entre les bornes de Reuss, de Voigt et celles de Hashin–Shtrikman (HS^-, HS^+). C'est le même constat pour les résultats avec $\mathcal{T}^{quad.}$ à l'exception des microstructures à particules sphériques obtenus en CLCH et CLF avec $\mathcal{T}^{quad.}$ qui sont légèrement sous la borne HS^-. Les effets de bord occasionnent une baisse de la valeur des modules en CLCH et CLF qui est suffisante pour avoir des valeurs sous la borne HS^-. Ce phénomène n'est pas observé avec les VES chargés en particules cylindriques puisqu'ils sont plus rigides. Également, les VES discrétisés en éléments quadratiques ont des modules légèrement surestimés ce qui pourrait compenser les effets de bord.

4.3 Discussion sur l'intérêt de l'approche intégrée

La caractérisation numérique d'un matériau hétérogène à particules est souvent une tâche très complexe. Le matériau hétérogène est rarement constitué de particules sphériques distribuées selon des arrangements périodiques définis. Souvent, il est constitué de particules aux formes diverses, distribuées d'une façon aléatoire et avec des propriétés intrinsèques variables d'une particule à l'autre. Pour représenter fidèlement ce caractère aléatoire, la description du milieu homogène équivalent doit être statistique. La mise en application des étapes de la modélisation par changement d'échelle qui sont la représentation, la localisation et l'homogénéisation, doit être en accord avec cette description statistique. Beaucoup d'efforts ont été dirigés sur l'élaboration de modèles numériques représentant spécifiquement certains matériaux. Leur méthodologie est axée sur la résolution d'un problème précis ce qui fait en sorte que ces modèles ne sont, pour la plupart, pas généralisables. Les principaux obstacles à la généralisation de ces modèles sont l'absence d'un cadre géométrique étoffé et d'une méthode de discrétisation automatique. La méthode de construction automatique du modèle numérique (chapitre 3) présentée dans ce projet surmonte ces obstacles en se basant sur l'approche intégrée (CAO, maillage, MEF) qui vise à unir tous les outils nécessaires à l'élaboration d'un modèle géométrique, à la discrétisation du modèle géométrique et à la simulation par la MEF. Cette approche est mise en pratique grâce au modèle de topologie unifié (section 2.3.3).

Un des atouts majeurs de l'approche intégrée pour la modélisation numérique des microstructures est l'utilisation d'un modèle CAO, plus précisément de la modélisation géométrique de type solide (BREP-arbre de construction) dans le cadre de la CAO. Dans cette étude, les particules modélisées sont de formes sphériques et cylindriques. La méthode employée pour générer et positionner les deux types de particules est la même à la seule différence que la sphère n'a pas d'orientation. Cette méthode est applicable à n'importe quelle forme de particules. Cette généralisation est rendue possible grâce aux méthodes de modélisation géométriques qui permettent de modéliser des formes géométriques très complexes avec une grande précision. Lors de l'étape de génération par la méthode RSA, les outils de la modélisation géométrique sont employés pour évaluer si une nouvelle particule chevauche une particule existante. Sans ces outils, cette évaluation peut s'avérer très difficile à effectuer pour des formes non sphériques. Le concept de co-topologie implémenté dans le MTU permet de représenter qu'une seule fois les entités topologiques communes aux particules et à la matrice ce qui assure la validité topologique du modèle et simplifie grandement la génération du maillage. Les résultats de cette étude montrent que l'utilisation de la CAO permet d'avoir un contrôle précis sur le modèle géométrique. En effet, les fractions volumiques de particules des modèles géométriques correspondent presque exactement aux fractions volumiques cibles. Les centres de masse et les moments quadratiques indiquent que les distributions des positions des particules sont isotropes et les tenseurs d'orientation indiquent que les particules sont orientées de façon aléatoire. La différence entre les modules apparents calculés avec les microstructures chargées en particules sphériques et celles chargées en particules cylindriques démontre que la prise en compte de géométrie des particules est importante. La liaison des méthodes de modélisation géométriques avec les outils de maillage améliore la discrétisation de la microstructure. L'utilisation d'une carte de taille permet de minimiser le nombre d'éléments de maillage tout en assurant une localisation adéquate des champs. La carte de taille présentée dans cette étude (section 3.2) utilise conjointement les outils de la CAO et de maillage afin de raffiner localement la taille des éléments en fonction de la distance entre les entités topologiques du modèle géométrique de la microstructure. Les méthodes de maillage automatique, utilisées pour discrétiser les microstructures, sont issues du développement de longue date de la génération automatique du maillage de modèle CAO. Ces méthodes sont robustes et éprouvées. L'analyse des maillages de cette étude témoigne de la plus value de l'intégration CAO-maillage. Les maillages sont adaptés aux microstructures et les éléments sont de bonne qualité. La génération des éléments quadratiques aux nœuds repoussés aux frontières courbées est une autre possibilité qu'offre l'intégration CAO-maillage. Ces éléments permettant ainsi d'éliminer l'effet de pavage. Les fractions volumiques des maillages quadratiques sont donc très proches des fractions volumiques cibles. Finalement, l'intégration CAO, maillage et MEF permet de générer automatiquement les études EF et l'importation des résultats dans le MTU permet de calculer automatiquement les modules apparents ce qui simplifie l'analyse des résultats.

L'approche intégrée rend possible la généralisation de la modélisation numérique des microstructures et son automatisation. En suivant cette approche, un concepteur peut développer et améliorer des outils de modélisation numérique qui seront disponibles pour toute sorte de microstructures. L'utilisation des outils matures et éprouvés de la CAO et du maillage automatique génère des modèles numériques précis et de bonne qualité.

Chapitre 5

Utilisation de la dynamique des corps rigides et méthode d'érosion

Une limitation importante de la méthode de génération des microstructures par l'algorithme RSA (2.2.1.1) est le fait qu'une fois une particule insérée, elle demeure fixe dans l'espace. À un certain point, il devient impossible de rajouter plus de particules, car chaque nouvelle tentative entre en interférence avec une particule existante. Une solution élégante à ce problème consiste à utiliser la dynamique des corps rigides pour simuler le mouvement et les contacts des particules. De plus, cette approche est conforme à la réalité physique du procédé de fabrication d'un composite où les particules peuvent se déplacer et se cogner entre elles. La prise en compte du mouvement des particules permet d'en amasser plus que la méthode RSA et ainsi atteindre des fractions volumiques élevées. La méthode de génération des microstructures par la méthode DCR est détaillée à la section 3.1.5.

Tout comme pour la méthode RSA, l'insertion d'une nouvelle particule par la méthode DCR doit respecter une liste de critères d'insertion afin que le maillage de la microstructure converge et soit de taille raisonnable pour les moyens de calculs disponibles. Le respect de ces critères fait en sorte que certaines particules au bord du VES ne sont pas insérées (Figure 5.1). Cette situation est plus problématique avec la méthode DCR puisqu'aucune autre particule ne peut être générée pour combler l'espace vide. La solution, mise de l'avant pour résoudre ce problème, est d'accepter le fait que certaines particules ne peuvent être insérées, d'effectuer les calculs nécessaires sur la microstructure imparfaite et d'homogénéiser seulement la portion du VES ou toutes les particules sont présentes.

La section 5.1 décrit le plan d'expériences numérique et les résultats sont analysés à la section 5.2. Une discussion sur la méthode d'érosion (section 3.5) est présentée à la section 5.3.

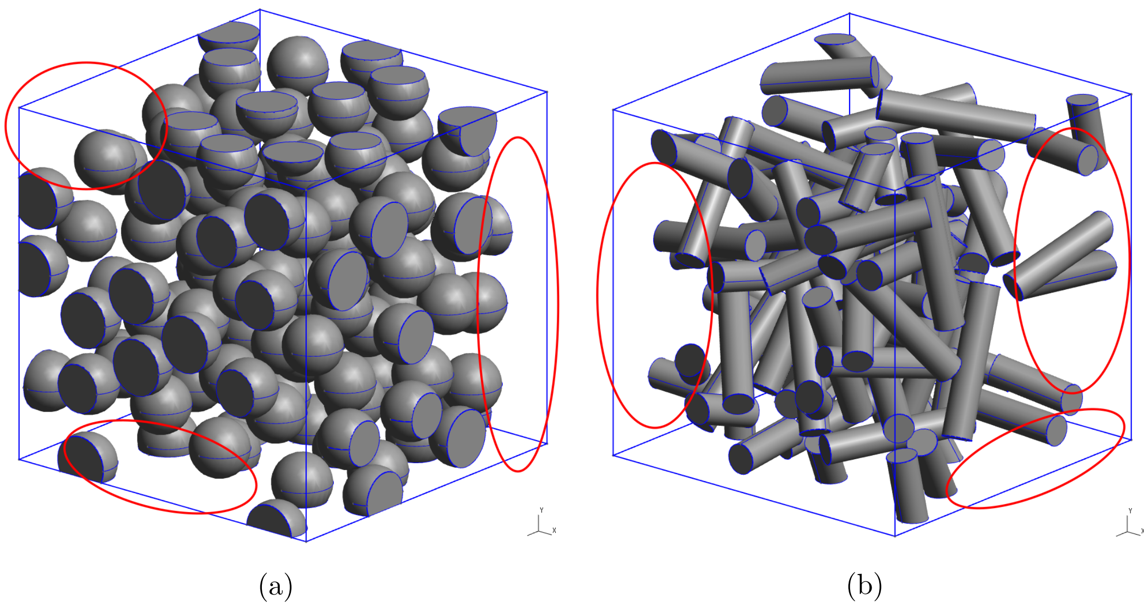


FIGURE 5.1 – Illustration des vides générés par les échecs d'insertion de particules pour $f_{vol_{cible}} = 30\%$. a) Particules sphériques $f_{vol} = 27\%$. Particules cylindriques $f_{vol} = 17\%$.

5.1 Plan d'expériences numérique

5.1.1 Génération des microstructures

Dans ce plan, les microstructures du composite verre/époxyde obtenues par la méthode RSA (section 4.2) sont réutilisées afin d'illustrer les effets de la méthode d'érosion. À ces microstructures, s'ajoute celles générées par la méthode DCR. La table 5.1 liste les essais numériques réalisés. Les essais réalisés avec la méthode RSA portent le préfixe RSA et ceux avec la méthode DCR ont le préfixe DCR. Les suffixes INT indiquent que les intersections avec les bords du VES sont autorisées dans la mesure où elles respectent les critères d'insertion (3.1). Le suffixe NOI indique que les intersections avec les bords sont interdites et donc qu'une particule qui touche un bord du VES est systématiquement refusée. Le générateur DCR suit les mêmes paramètres que le générateur RSA détaillé à la section 4.1.2. Les maillages quadratiques sont générés de la même façon que celle décrite à la section 4.1.3.

TABLE 5.1 – Liste des essais numériques

Particules	Nom	$Geo_{\mathcal{P}}$	f_{vol} (%)	Nb. VES
Sphère	RSA_S1FV05	$Dia = 1/6$	5%	100
	RSA_S1FV10	$Dia = 1/6$	10%	100
	RSA_S2FV10	$Dia = 1/8$	10%	20
	DCR_S1FV10_INT	$Dia = 1/6$	10%	100
	DCR_S1FV10_NOI	$Dia = 1/6$	10%	100
	DCR_S1FV30_NOI	$Dia = 1/6$	30%	10
	DCR_S2FV30_NOI	$Dia = 1/8$	30%	3
Cylindre	RSA_C1FV05	$Dia = 0.085, L/D = 5$	5%	100
	RSA_C1FV10	$Dia = 0.085, L/D = 5$	10%	100
	RSA_C2FV10	$Dia = 0.064, L/D = 5$	10%	20
	DCR_C1FV10_INT	$Dia = 0.085, L/D = 5$	10%	100
	DCR_C1FV10_NOI	$Dia = 0.085, L/D = 5$	10%	100
	DCR_C1FV30_NOI	$Dia = 0.085, L/D = 5$	30%	10
	DCR_C2FV30_NOI	$Dia = 0.064, L/D = 5$	30%	3

5.1.2 Génération des études EF et érosion

Le comportement mécanique en élasticité linéaire du composite verre / époxy est étudié. Comme au chapitre 4, le comportement est considéré comme isotrope et est calculé à partir des chargements CLDH et CLCH sphériques et déviatoriques. Les VES sont progressivement érodés et l'homogénéisation est réalisée à partir des résultats aux points de Gauss des éléments présents dans la boîte englobante définie par la distance d'érosion d_e (section 3.5). Les modules d'élasticité apparents sont calculés à partir des moyennes volumiques des champs érodés pour chaque valeur de d_e.

5.2 Analyse des résultats

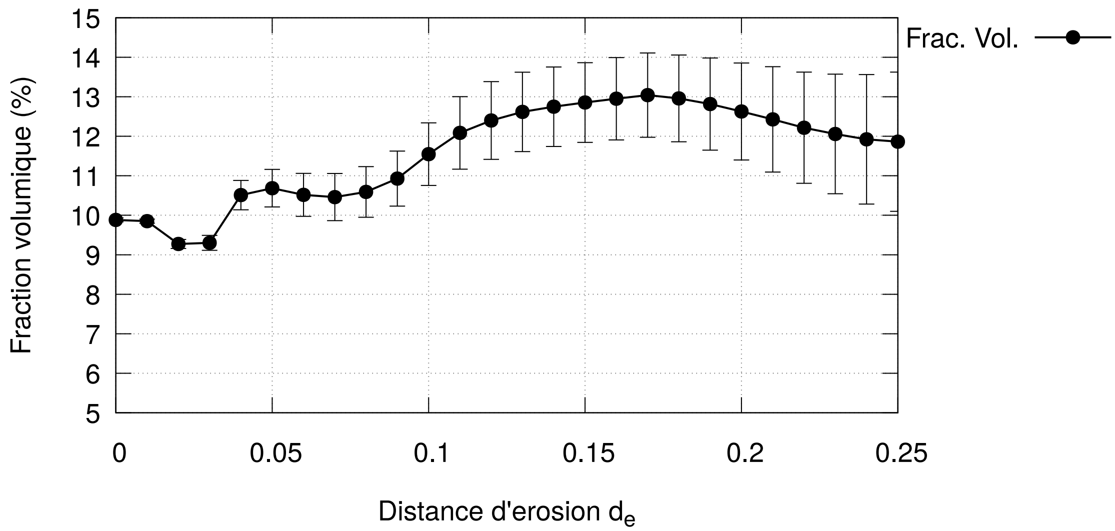
L'analyse des résultats est divisée en deux sections. La section 5.2.1 présente une analyse des résultats obtenus par l'érosion des VES générés par la méthode RSA du chapitre précédent. Cette analyse a pour but d'illustrer l'influence de la distance d'érosion sur les différents résultats numériques. La section 5.2.2 détaille l'analyse des résultats obtenus par la méthode DCR.

5.2.1 Méthode d'érosion appliquée aux VES générés par la méthode RSA

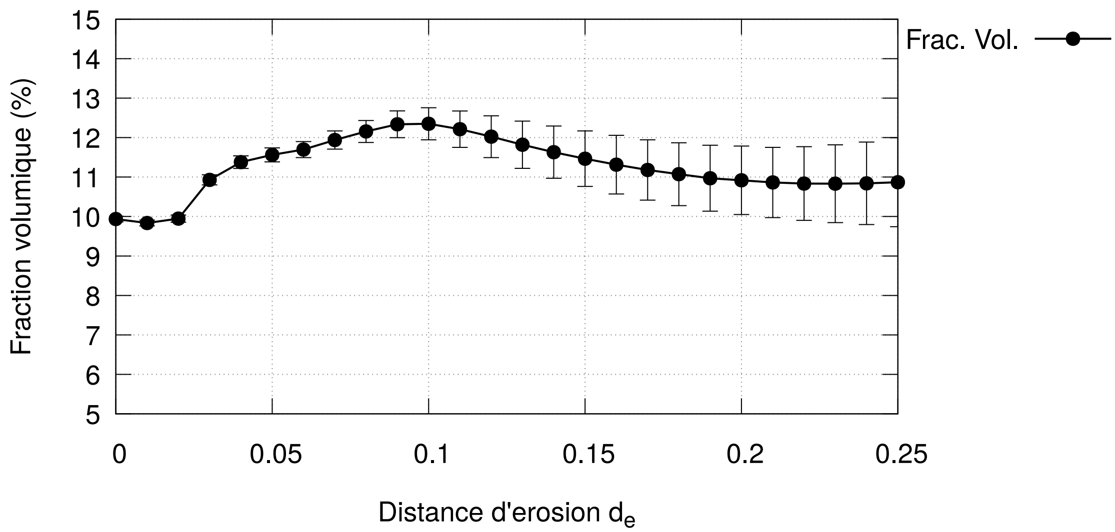
La méthode d'érosion est appliquée aux VES générés par la méthode RSA afin d'évaluer l'influence de la distance d'érosion d_e sur : la fraction volumique des particules (section 5.2.1.1), le module d'élasticité (section 5.2.1.2), l'écart de chargement (section 5.2.1.3), l'écart en énergie de déformation (section 5.2.1.4) et le respect de la condition de macrohomogénéité de Hill (section 5.2.1.5). Une brève discussion sur le choix de la distance d'érosion est présentée à la section 5.2.1.6.

5.2.1.1 Influence de la distance d'érosion sur la fraction volumique de particules

La figure 5.2 illustre l'évolution de la fraction volumique de particules des essais numériques RSA_S1FV10 et RSA_C1FV10 évaluée à partir des maillages quadratiques. Lorsque la distance est nulle, la fraction volumique de particules correspond à la fraction volumique cible de 10%. Plus la distance d'érosion augmente, plus la fraction volumique de particules augmente jusqu'à atteindre un plateau aux alentours de $d_e = 0.2$. Cette augmentation illustre les effets de bord causés par les critères d'insertion des particules. En effet, il est plus difficile d'insérer une particule à proximité des bords du VES qu'en son cœur. Ainsi, statistiquement une particule possède plus de chance de se retrouver au centre du VES qu'au bord. La table 5.2 répertorie les fractions volumiques des microstructures générées par la méthode RSA sans érosion et avec une distance d'érosion de 0.2. Les fractions volumiques à $d_e = 0.2$ sont toutes supérieures aux fractions volumiques initiales. L'augmentation de la fraction volumique cible de particules réduit l'écart entre les fractions volumiques érodées et non érodées. La réduction d'écart est aussi observée avec l'augmentation de la taille des VES. La fraction volumique en fonction de d_e des microstructures de type FV05 présente une évolution qui est en forme d'escalier (Fig. 5.3). Ce type d'évolution est occasionné par la taille des éléments de maillage par rapport au pas de la distance d'érosion. Lors de l'érosion, les éléments sont conservés si le centre de leur boîte englobante est à l'intérieur du cube défini par d_e. Un élément de grande taille sera conservé pour une valeur de d_e plus grande qu'un élément de petite taille. Ce phénomène est plus prononcé avec les microstructures de type FV05 puisque la carte de taille n'est pas aussi raffinée que pour les microstructure dont la fraction volumique est plus élevée.



(a) RSA_S1FV10



(b) RSA_C1FV10

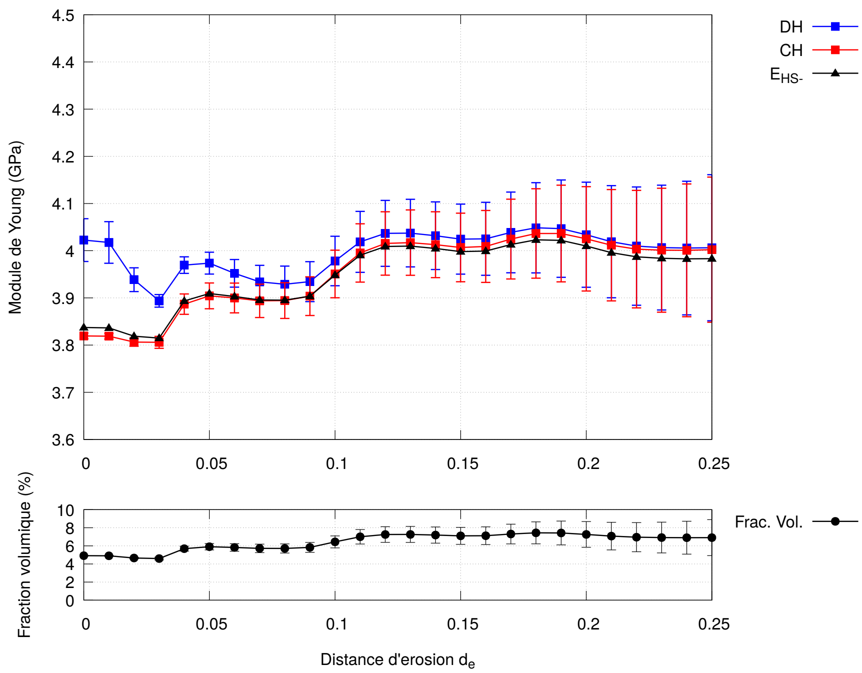
FIGURE 5.2 – Illustration de la variation de la fraction volumique en fonction de la distance d'érosion du cube unitaire. a) RSA_S1FV10. b) RSA_C1FV10.

TABLE 5.2 – Fractions volumiques de particules en fonction de la distance d'érosion d_e

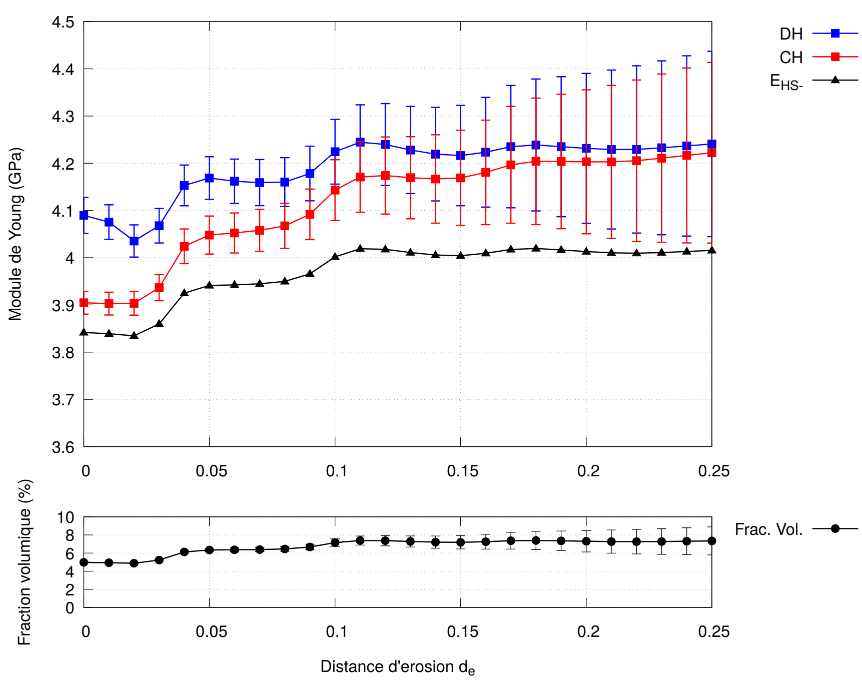
Nom	f_{vol}		
	$d_e = 0.0$	$d_e = 0.2$	$\Delta(\%)$
RSA_S1FV05	4.91 ±0.05	7.26 ±1.42	47.86
RSA_S1FV10	9.88 ±0.05	12.63 ±1.23	27.83
RSA_S2FV10	9.70 ±0.12	11.56 ±0.60	19.17
RSA_C1FV05	4.97 ±0.06	7.31 ±1.19	48.29
RSA_C1FV10	9.94 ±0.07	10.92 ±0.87	9.85
RSA_C2FV10	9.88 ±0.02	10.42 ±0.75	5.46

5.2.1.2 Influence de la distance d'érosion sur le module d'élasticité

La variation de fraction volumique selon d_e entraîne nécessairement une variation du module d'élasticité apparent des microstructures. Si la fraction volumique augmente, il est logique de penser que le module d'élasticité apparent augmente aussi. Ce n'est cependant pas toujours le cas. Les figures 5.3 à 5.5 illustre la variation de E_{app} en fonction de d_e pour les différents types de microstructures. Une des observations intéressantes de cette figure est le rapprochement progressif des résultats en CLDH et CLCH. Ce rapprochement illustre clairement la présence d'effets de bord dus aux conditions aux limites et à la méthode d'insertion des particules. Cette observation supporte aussi l'explication des résultats en CLCH de la figure 5.4a qui sont initialement sous la borne HS^- à cause des effets de bord et qui, plus la distance d'érosion augmente, traversent de l'autre côté de HS^-. Les courbes sous-jacentes de $f_{vol}(d_e)$ permettent d'observer que E_{app} suit l'évolution de f_{vol}. La table 5.3 recense les modules d'élasticité pour les VES non érodés et pour $d_e = 0.2$. À $d_e = 0.2$, tous les résultats en CLDH sont au-dessus de HS^- et l'écart $\Delta(\%)$ entre les modules en CLDH et CLCH est fortement réduit. L'écart-type des modules augmente légèrement en fonction de d_e mais l'enveloppe formée par la moyenne des résultats en CLDH plus ± et les résultats CLCH moins ± est tout de même plus étroite que sans érosion.

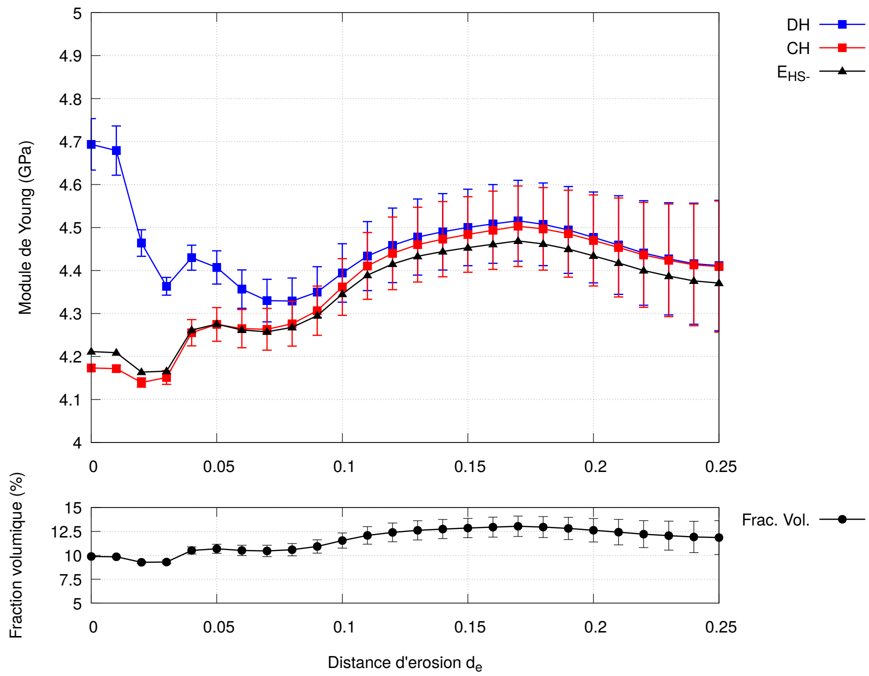


(a) RSA_S1FV05

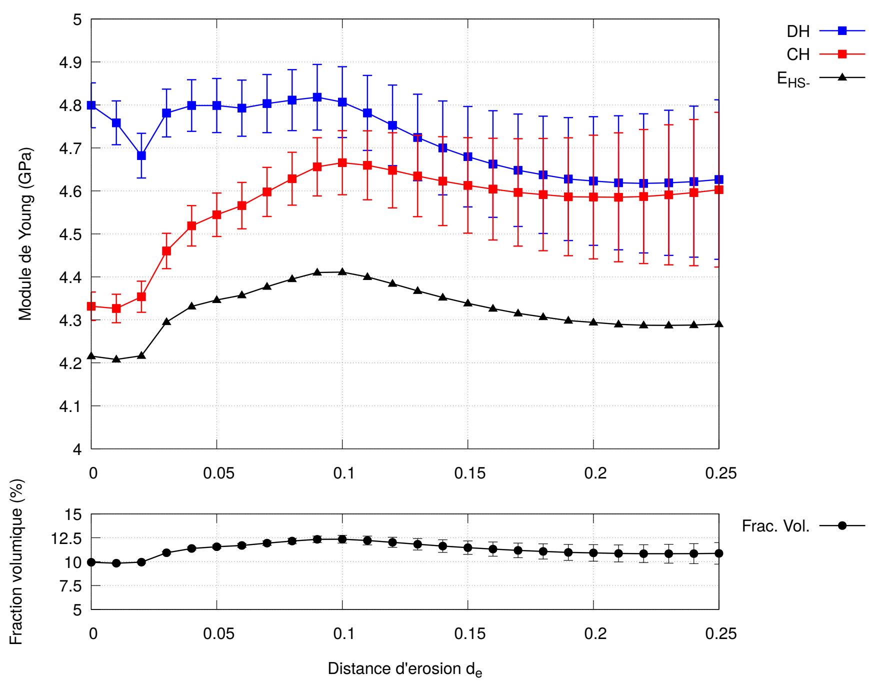


(b) RSA_C1FV05

FIGURE 5.3 – Illustration de la variation des modules E_{app} en fonction de d_e. a) RSA_S1FV05. b) RSA_C1FV05.

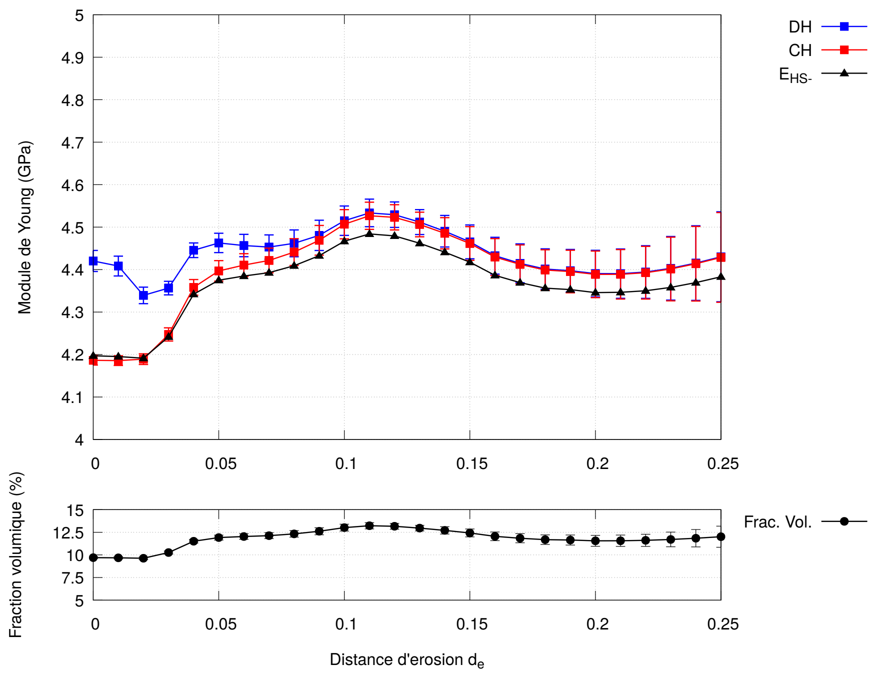


(a) RSA_S1FV10

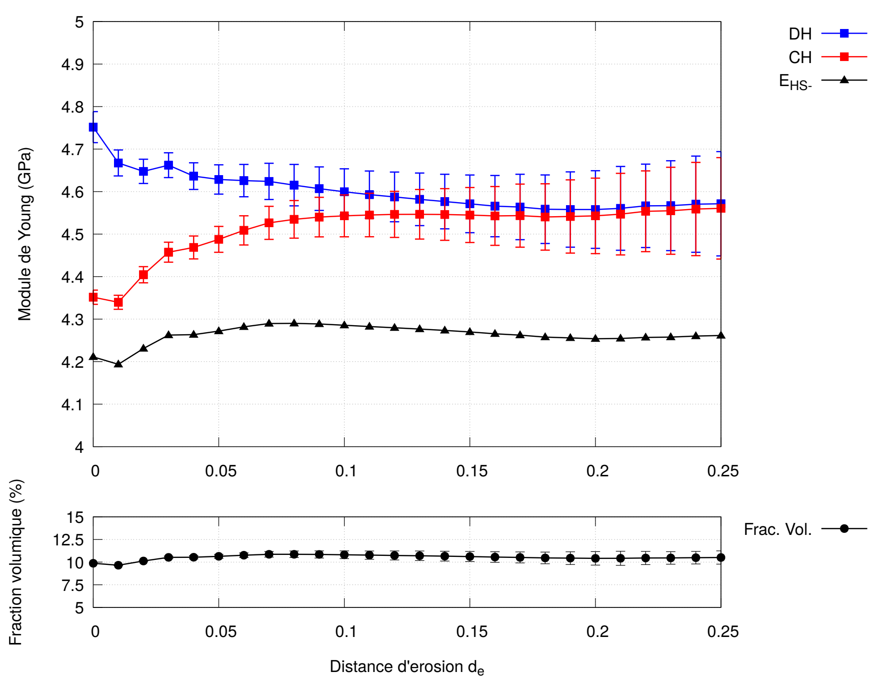


(b) RSA_C1FV10

FIGURE 5.4 – Illustration de la variation des modules E_{app} en fonction de d_e. a) RSA_S1FV10. b) RSA_C1FV10.



(a) RSA_S2FV10



(b) RSA_C2FV10

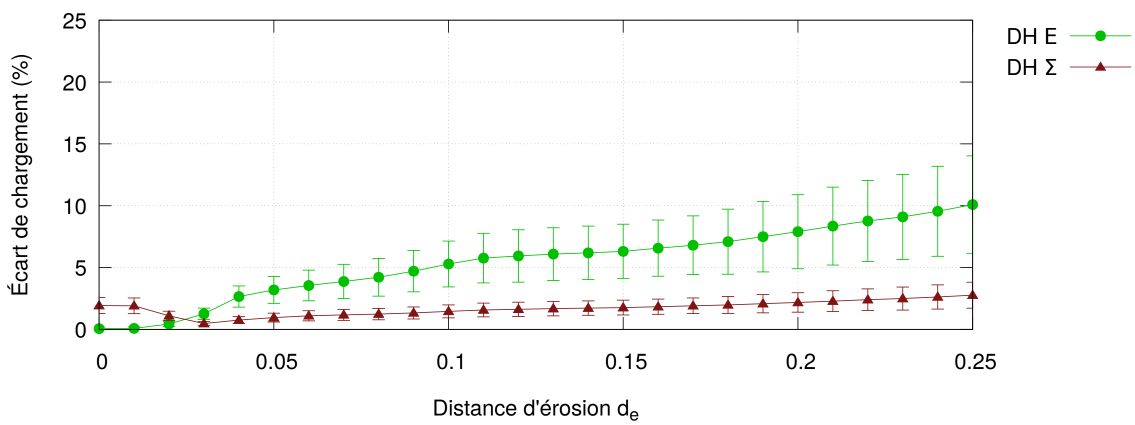
FIGURE 5.5 – Illustration de la variation des modules E_{app} en fonction de d_e. a) RSA_S2FV10. b) RSA_C2FV10.

TABLE 5.3 – Module d'élasticité apparent E_{app} (GPa)

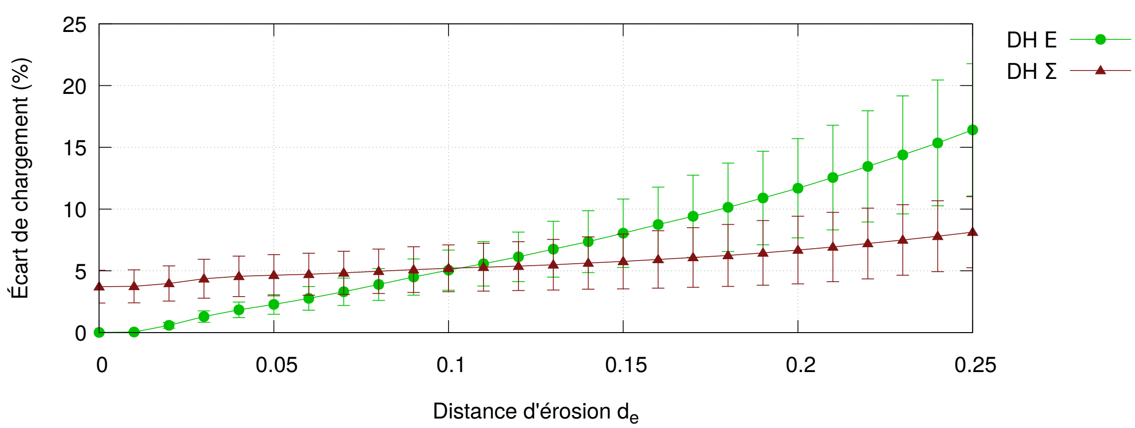
Nom	d_e	$f_{vol}(\%)$	Résultats numériques			Bornes analytiques			
			CLDH	CLCH	$\Delta(\%)$	Reuss	HS^-	HS^+	Voigt
RSA_S1FV05	–	4.91 ±0.05	4.023 ±0.045	3.819 ±0.006	5.05	3.671	3.837	5.367	6.951
	0.2	7.26 ±1.42	4.034 ±0.111	4.025 ±0.111	0.22	3.759	4.009	6.284	8.584
RSA_S1FV10	–	9.88 ±0.05	4.694 ±0.060	4.173 ±0.007	11.09	3.863	4.211	7.326	10.398
	0.2	12.63 ±1.23	4.477 ±0.106	4.470 ±0.106	0.16	3.978	4.434	8.446	12.298
RSA_S2FV10	–	9.70 ±0.12	4.420 ±0.025	4.186 ±0.011	5.29	3.855	4.197	7.254	10.274
	0.2	11.56 ±0.60	4.391 ±0.055	4.389 ±0.055	0.04	3.932	4.346	8.007	11.559
RSA_C1FV05	–	4.97 ±0.06	4.090 ±0.038	3.905 ±0.024	4.52	3.673	3.841	5.390	6.993
	0.2	7.31 ±1.19	4.232 ±0.159	4.203 ±0.152	0.67	3.761	4.013	6.303	8.619
RSA_C1FV10	–	9.94 ±0.07	4.799 ±0.052	4.332 ±0.033	9.74	3.865	4.216	7.350	10.440
	0.2	10.92 ±0.87	4.623 ±0.150	4.586 ±0.144	0.81	3.905	4.294	7.746	11.117
RSA_C2FV10	–	9.88 ±0.02	4.752 ±0.037	4.352 ±0.017	8.42	3.863	4.211	7.326	10.398
	0.2	10.42 ±0.75	4.558 ±0.091	4.543 ±0.089	0.33	3.885	4.254	7.544	10.771

5.2.1.3 Influence de la distance d'érosion sur l'écart des chargements

Comme mentionné dans le plan d'expériences, le comportement du composite verre / époxy est considéré comme étant isotrope. Le module E_{app} est calculé à partir du module de compressibilité K_{app} et du module de cisaillement G_{app} qui sont évalués à l'aide des chargements purement sphérique et déviatorique. Les figures 5.6 à 5.9 illustrent l'évolution de l'écart des chargements sphériques $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ et déviatoriques $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^D(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH et CLCH (section 3.5.1.2) des VES de type RSA_S1FV10 RSA_C1FV10. L'évolution de l'écart de chargements des autres types de VES sont disponibles en annexe B.1. Les valeurs d'écart de chargements pour $d_e = 0.0$ et $d_e = 0.2$ sont répertoriées aux tables 5.4 et 5.5.

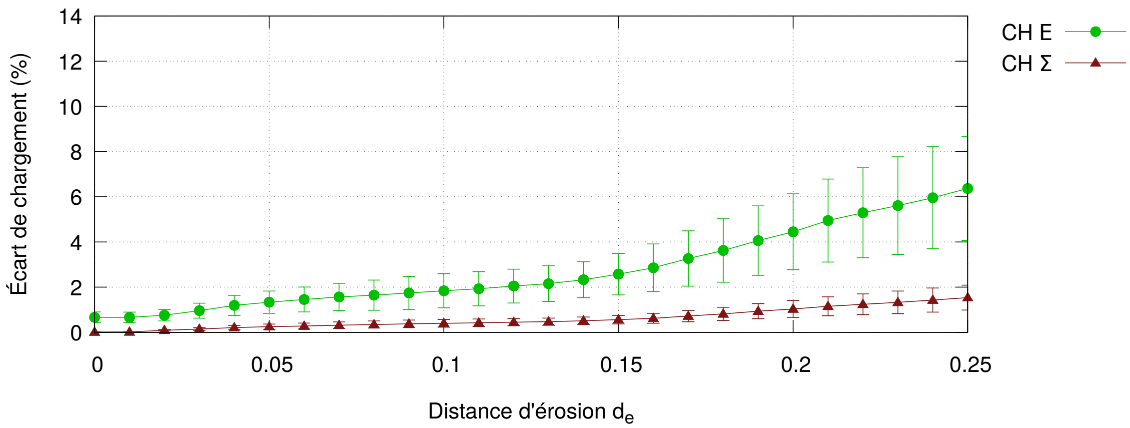


(a) RSA_S1FV10

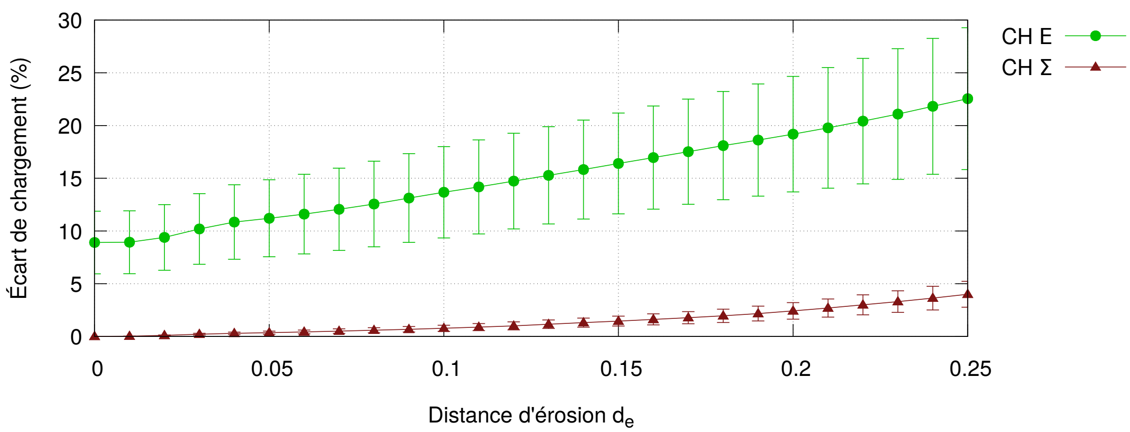


(b) RSA_C1FV10

FIGURE 5.6 – Illustration de l'écart des chargements sphériques $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH. a) RSA_S1FV10. b) RSA_C1FV10.

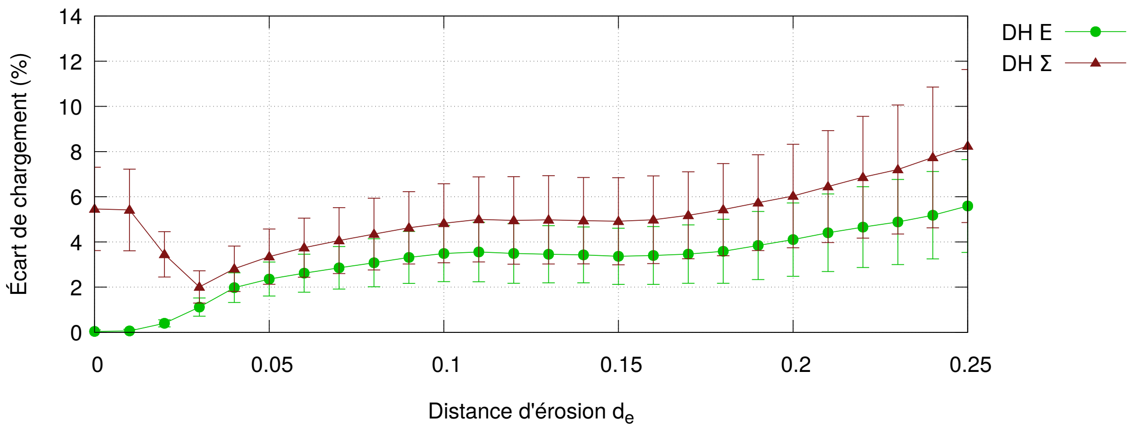


(a) RSA_S1FV10

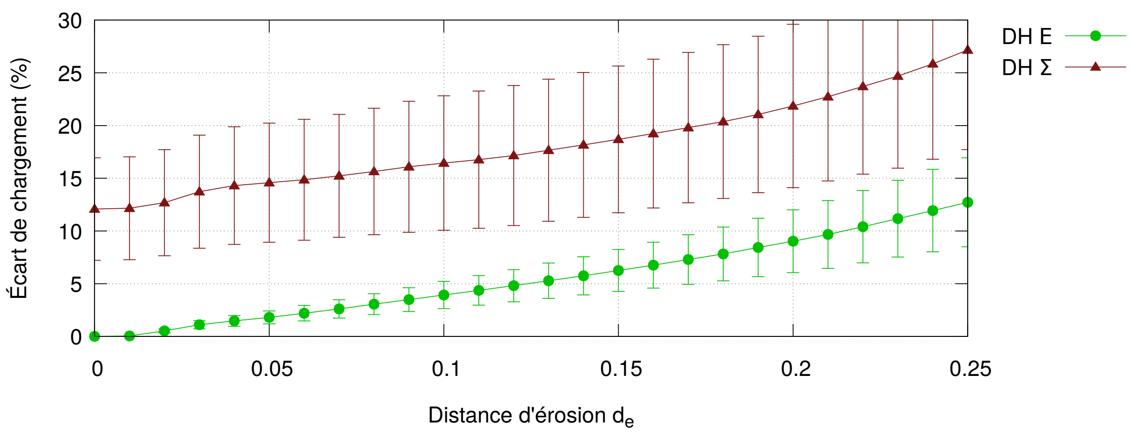


(b) RSA_C1FV10

FIGURE 5.7 – Illustration de l'écart des chargements sphériques $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLCH. a) RSA_S1FV10. b) RSA_C1FV10.

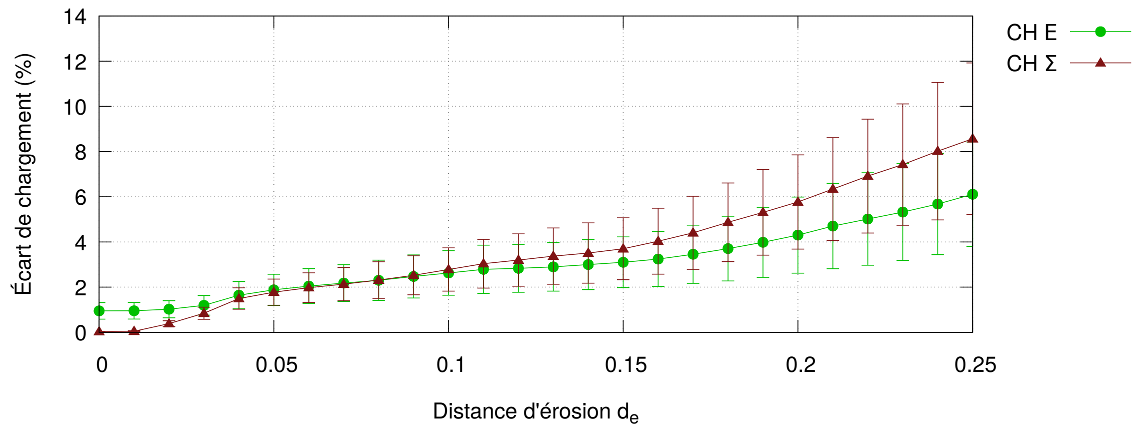


(a) RSA_S1FV10

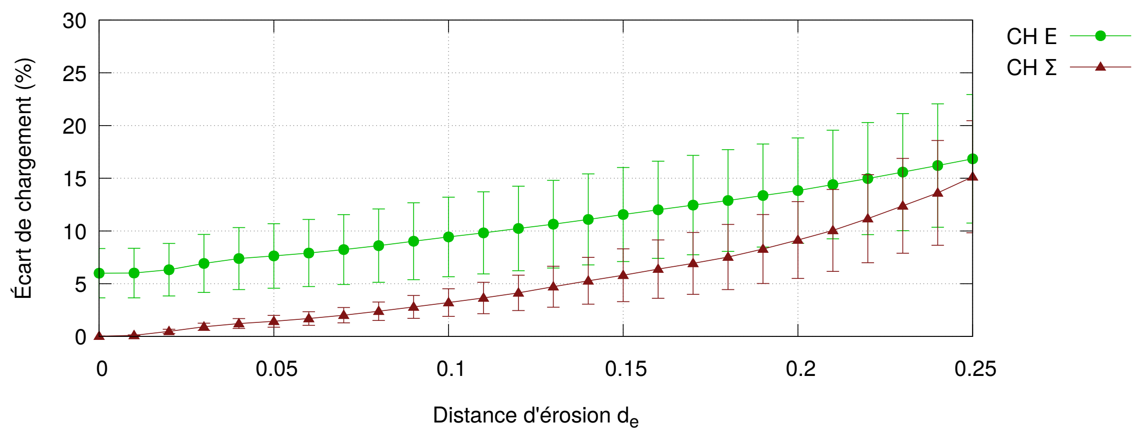


(b) RSA_C1FV10

FIGURE 5.8 – Illustration de l'écart des chargements déviatoriques $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH. a) RSA_S1FV10. b) RSA_C1FV10.



(a) RSA_S1FV10



(b) RSA_C1FV10

FIGURE 5.9 – Illustration de l'écart des chargements déviatoriques $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLCH. a) RSA_S1FV10. b) RSA_C1FV10.

En CLDH, à une distance d'érosion nulle, l'écart de chargement du $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ est nul tandis que l'écart $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ se situe autour de 5%. La situation est inverse avec les conditions CLCH. Lorsque d_e augmente, $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$, $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ et $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$, $\Delta^D(\underline{\underline{\Sigma}})$ augmentent légèrement. L'augmentation est plus prononcée pour le tenseur $\underline{\underline{E}}$ en CLDH et plus prononcée pour le tenseur $\underline{\underline{\Sigma}}$ en CLCH pour les deux types de chargement. Les écarts de chargement $d_e = 0.2$ sont plus prononcés chez les microstructures constituées de particules cylindriques que celles constituées de particules sphériques. Les écarts de chargements pour $d_e = 0.2$ demeurent toutefois relativement faibles.

TABLE 5.4 – Écart de chargement sur $\underline{\underline{E}}$ (%)

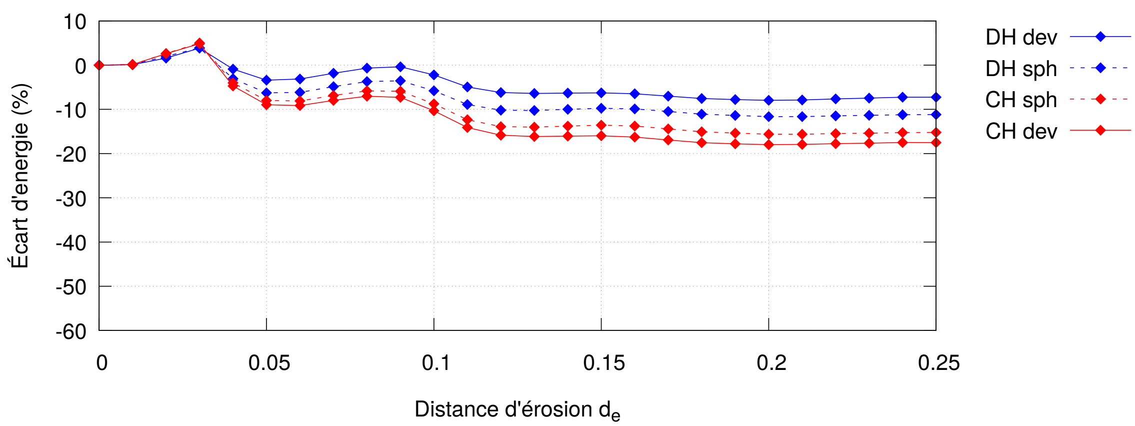
Nom	d_e	Δ^S		Δ^D	
		CLDH	CLCH	CLDH	CLCH
RSA_S1FV05	–	0.024 ±0.012	0.489 ±0.183	0.020 ±0.006	0.607 ±0.262
	0.2	7.643 ±2.359	3.328 ±1.184	3.877 ±1.313	4.050 ±1.597
RSA_S1FV10	–	0.056 ±0.132	0.665 ±0.237	0.038 ±0.072	0.950 ±0.366
	0.2	7.898 ±2.994	4.451 ±1.681	4.103 ±1.622	4.303 ±1.684
RSA_S2FV10	–	0.065 ±0.031	0.327 ±0.123	0.069 ±0.129	0.674 ±0.282
	0.2	5.762 ±1.550	2.945 ±1.203	2.960 ±1.043	2.830 ±1.141
RSA_C1FV05	–	0.004 ±0.002	6.761 ±2.219	0.004 ±0.001	4.586 ±1.636
	0.2	11.35 ±4.266	16.49 ±5.579	7.414 ±2.752	11.43 ±4.559
RSA_C1FV10	–	0.010 ±0.040	8.911 ±2.971	0.007 ±0.014	5.997 ±2.341
	0.2	11.68 ±4.016	19.19 ±5.477	9.027 ±2.977	13.83 ±4.995
RSA_C2FV10	–	0.009 ±0.002	6.377 ±2.521	0.007 ±0.002	4.963 ±1.693
	0.2	8.249 ±2.204	14.82 ±4.215	6.475 ±2.323	11.20 ±5.245

TABLE 5.5 – Écart de chargement sur $\underline{\underline{\Sigma}}$ (%)

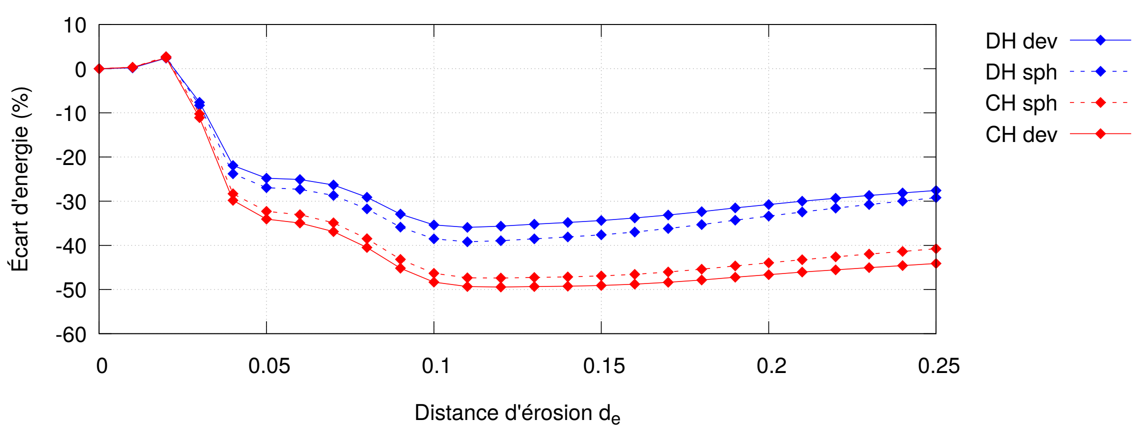
Nom	d_e	Δ^S		Δ^D	
		CLDH	CLCH	CLDH	CLCH
RSA_S1FV05	–	1.167 ±0.544	0.007 ±0.002	3.548 ±1.544	0.025 ±0.010
	0.2	2.036 ±0.617	0.834 ±0.295	6.790 ±2.845	6.229 ±2.710
RSA_S1FV10	–	1.929 ±0.653	0.013 ±0.002	5.462 ±1.844	0.033 ±0.013
	0.2	2.177 ±0.787	1.034 ±0.372	6.032 ±2.290	5.770 ±2.085
RSA_S2FV10	–	0.914 ±0.196	0.024 ±0.006	2.153 ±0.580	0.061 ±0.122
	0.2	1.683 ±0.435	0.774 ±0.310	3.899 ±1.168	3.117 ±1.419
RSA_C1FV05	–	2.699 ±0.975	0.003 ±0.001	8.848 ±3.531	0.015 ±0.007
	0.2	5.411 ±2.005	1.942 ±0.708	18.09 ±6.572	9.032 ±3.470
RSA_C1FV10	–	3.720 ±1.328	0.004 ±0.005	12.08 ±4.859	0.022 ±0.014
	0.2	6.683 ±2.740	2.424 ±0.787	21.86 ±7.746	9.146 ±3.642
RSA_C2FV10	–	2.163 ±0.843	0.005 ±0.002	6.897 ±2.185	0.022 ±0.010
	0.2	4.588 ±1.621	1.736 ±0.388	13.06 ±5.099	6.481 ±2.319

5.2.1.4 Influence de la distance d'érosion sur l'écart en énergie de déformation

Les écarts en énergie de déformation Δ^{ed} (section 3.5.1.4) pour chaque configuration à une distance d'érosion $d_e = 0.2$ sont répertoriés à la table 5.6. La figure 5.10 illustre l'évolution de Δ^{ed} en fonction de d_e pour les microstructures de type RSA_S1FV10 et RSA_C1FV10. L'évolution de Δ^{ed} des autres microstructures sont disponibles en annexe B.2. Ces figures témoignent de la présence d'effets de bord dus aux critères d'insertion des particules. En effet, entre $d_e = 0.0$ et $d_e = 0.1$, Δ^{ed} chute de façon significative pour ensuite se stabiliser. La taille des VES affecte Δ^{ed}. L'énergie se stabilise à une valeur de d_e légèrement plus petite avec les VES RSA_S2FV10 et RSA_C2FV10. La chute de l'écart d'énergie est plus importante avec les microstructures composées de particules cylindriques. Cette chute indique que l'énergie de déformation au bord du VES est plus grande qu'au centre de celui-ci. Elle est expliquée par le fait qu'il y a moins de particules au bord du VES. La figure 5.11 illustre cette répartition du niveau d'énergie dans un VES de type RSA_C1FV10.



(a) RSA_S1FV10



(b) RSA_C1FV10

FIGURE 5.10 – Illustration de la variation de l'écart en énergie de déformation Δ^{ed} en fonction de d_e. a) RSA_S1FV10. b) RSA_C1FV10.

TABLE 5.6 – Écart en énergie de déformation Δ^{ed} (%) pour $d_e = 0.2$

Nom	Sphérique		Déviatorique	
	CLDH	CLCH	CLDH	CLCH
RSA_S1FV05	-6.10 ± 7.50	-8.56 ± 7.26	-3.47 ± 7.21	-10.20 ± 7.59
RSA_S1FV10	-11.64 ± 8.58	-15.63 ± 7.59	-7.95 ± 8.01	-17.98 ± 7.97
RSA_S2FV10	-20.88 ± 4.63	-24.91 ± 4.51	-13.87 ± 13.08	-25.51 ± 10.20
RSA_C1FV05	-48.99 ± 8.99	-52.85 ± 8.24	-47.27 ± 9.01	-54.63 ± 8.40
RSA_C1FV10	-33.38 ± 6.50	-43.95 ± 5.66	-30.76 ± 6.19	-46.64 ± 5.76
RSA_C2FV10	-14.40 ± 7.63	-24.05 ± 7.54	-12.61 ± 7.10	-26.54 ± 7.90

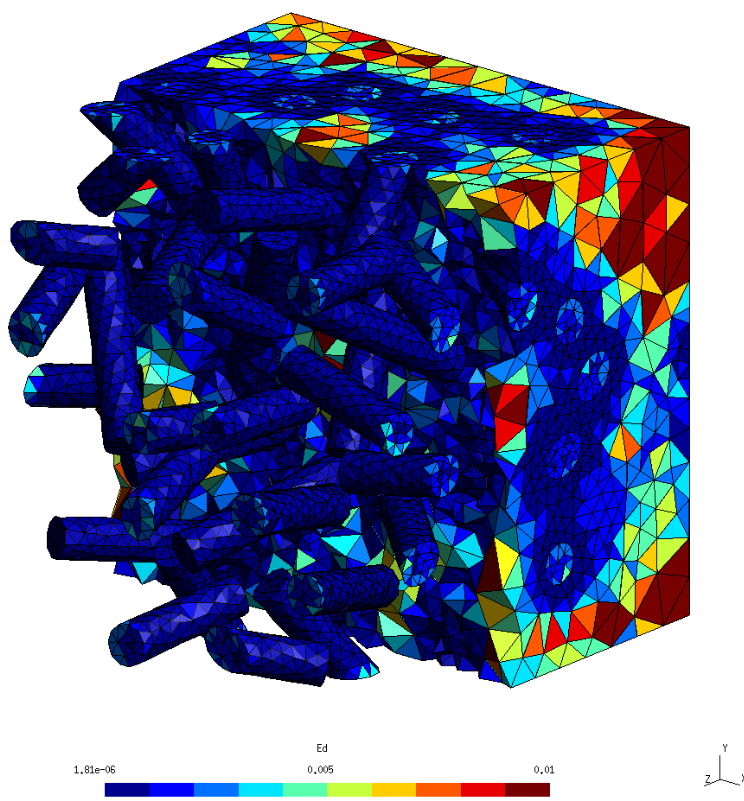
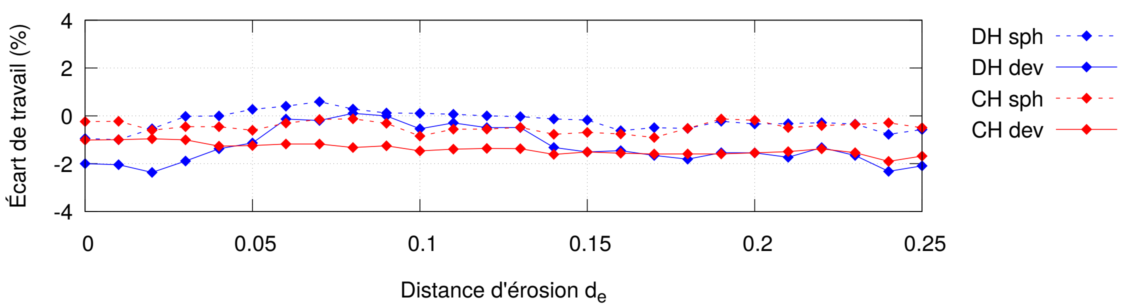


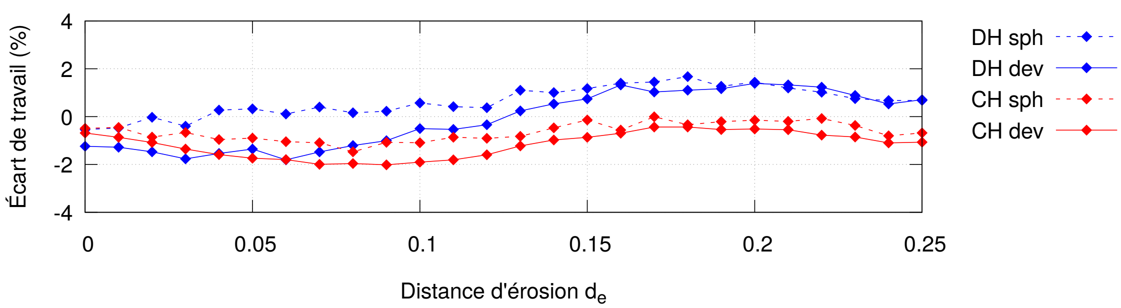
FIGURE 5.11 – Illustration de l'énergie de déformation pour un VES de type RSA_C1FV10 en CLDH sphérique. Le niveau d'énergie maximal est de 0.0286 (J/m^3) mais la limite maximale est fixée à 0.01 afin de mettre en évidence la différence d'énergie au bords du VES en en son centre.

5.2.1.5 Influence de la distance d'érosion sur l'écart entre le travail macroscopique et la moyenne volumique du travail mésoscopique

L'écart entre le travail macroscopique et la moyenne volumique du travail mésoscopique en fonction de la distance d'érosion $\Delta^{Hill}(d_e)$ (section 3.5.1.5) est évalué pour chaque type d'échantillon afin de s'assurer que les résultats homogénéisés répondent à la condition de macro-homogénéité de Hill. Cette condition stipule que le travail macroscopique $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}$ doit être égal à la moyenne volumique du travail mésoscopique $\langle \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\sigma}} \rangle$. La figure 5.12 illustre l'évolution de $\Delta^{Hill}(d_e)$ pour un VES de type RSA_S1FV10 et un VES de type RSA_C1FV10. Pour l'ensemble des VES réalisés, $\Delta^{Hill}(d_e)$ demeure inférieure à ±5%. La condition de Hill est donc approximativement respectée.



(a) RSA_S1FV10



(b) RSA_C1FV10

FIGURE 5.12 – Illustration de la variation l'écart de travail Δ^{Hill} en fonction de d_e. a) RSA_S1FV10. b) RSA_C1FV10.

5.2.1.6 Discussion sur le choix de la distance d'érosion

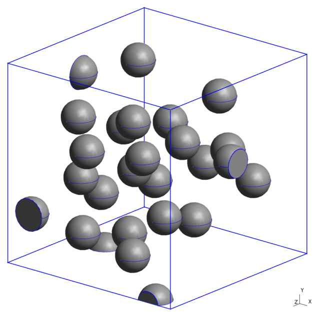
Le choix de la distance d'érosion d_e doit être effectué avec soin. Dans le cas présent, les résultats sont présentés pour $d_e = 0.2$ car à cette distance, la variation de l'écart en énergie de déformation Δ^{ed} est minime pour tous les types d'essais réalisés. Pour certains essais, comme le composite RSA_S2FV10, la distance d'érosion pourrait être fixée à $d_e = 0.125$ puisque Δ^{ed} varie peu à partir de ce point (Fig. B.10a). Un critère de sélection de la valeur acceptable de d_e pourrait être formulé en fonction de l'écart en énergie de déformation Δ^{ed} et des écarts de chargements ($\Delta^S(\underline{\underline{E}})$, $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$, $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$, $\Delta^D(\underline{\underline{\Sigma}})$).

5.2.2 Analyse des résultats des VES obtenus par la méthode DCR

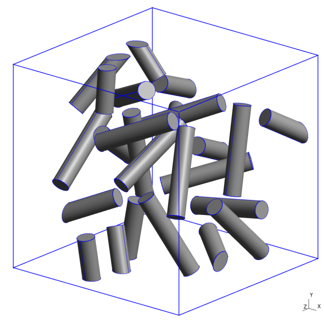
La méthode d'érosion est appliquée aux VES générés avec la méthode DCR et les résultats des microstructures avec une fraction volumique de 10% sont comparés avec les VES obtenus par la méthode RSA.

5.2.2.1 Géométrie

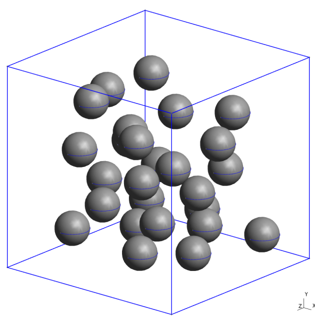
La figure 5.13 illustre le modèle BREP des différents types d'échantillons générés à partir de la méthode DCR. L'idée associée au fait de générer des microstructures par la méthode DCR en refusant toute particule qui intersecte les bords du VES est de minimiser la taille du modèle EF. En effet, plusieurs particules sont refusées à cause des critères d'insertion ce qui nécessite l'utilisation de la méthode d'érosion. Les résultats dans les particules au bord du VES ne sont donc pas pris en compte lors de l'homogénéisation. Le fait d'exclure complètement les particules aux bords du VES fait en sorte que la carte de taille n'a pas besoin d'être aussi raffinée.



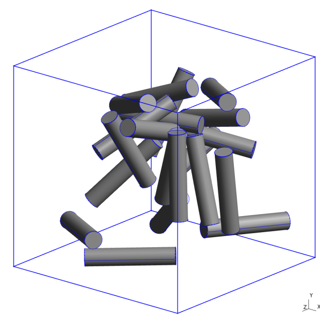
(a) DCR_S1FV10_INT



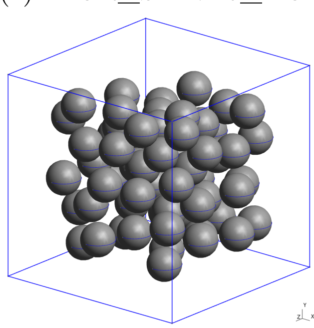
(b) DCR_S1FV10_INT



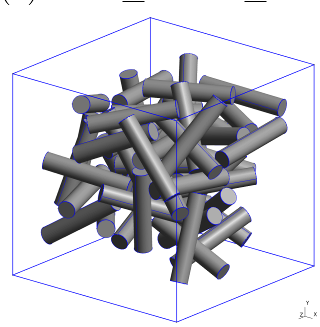
(c) DCR_S1FV10_NOI



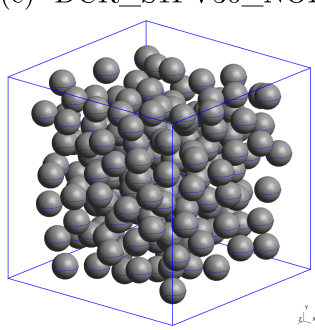
(d) DCR_S1FV10_NOI



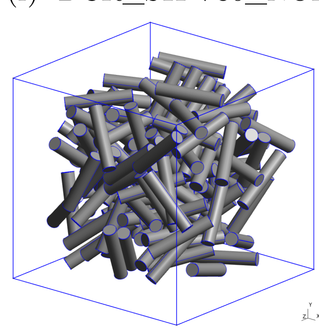
(e) DCR_S1FV30_NOI



(f) DCR_S1FV30_NOI



(g) DCR_S2FV30_NOI



(h) DCR_S2FV30_NOI

FIGURE 5.13 – Exemple de modèle BREP des microstructures à particules sphériques et cylindriques générés par la méthode DCR

Les centres de masse des particules positionnées dans le cube unitaire et les moments quadratiques par rapport aux axes principaux x, y, z sont présentés respectivement à la table 5.7 et la table 5.8. Les centres de masse sont positionnés au centre du cube unitaire et les moments quadratiques sont équivalents d'un axe à l'autre. La présence ou non de particules au bord des VES n'affecte en rien les centres de masse des particules. Les moments quadratiques des microstructures DCR_S1FV10_INT et DCR_C1FV10_INT sont plus élevés que ceux de DCR_S1FV10_NOI et DCR_C1FV10_NOI puisqu'il y a des particules au bord des VES.

Table 5.7 – Centre de masse des particules dans le cube unitaire

Nom	x	y	z
DCR_S1FV10_INT	0.500 ±0.030	0.501 ±0.027	0.495 ±0.026
DCR_S1FV10_NOI	0.501 ±0.026	0.501 ±0.026	0.504 ±0.024
DCR_S1FV30_NOI	0.501 ±0.015	0.501 ±0.010	0.502 ±0.007
DCR_S2FV30_NOI	0.497 ±0.009	0.499 ±0.006	0.499 ±0.006
DCR_C1FV10_INT	0.506 ±0.038	0.496 ±0.039	0.502 ±0.036
DCR_C1FV10_NOI	0.494 ±0.047	0.508 ±0.041	0.503 ±0.050
DCR_C1FV30_NOI	0.508 ±0.013	0.496 ±0.021	0.507 ±0.020
DCR_C2FV30_NOI	0.499 ±0.005	0.508 ±0.010	0.502 ±0.002

Table 5.8 – Moments quadratiques des particules par rapport aux axes principaux x, y, z

Nom	x	y	z
DCR_S1FV10_INT	0.0326 ±0.0033	0.0327 ±0.0033	0.0323 ±0.0032
DCR_S1FV10_NOI	0.0290 ±0.0028	0.0290 ±0.0030	0.0292 ±0.0025
DCR_S1FV30_NOI	0.0795 ±0.0032	0.0795 ±0.0028	0.0797 ±0.0034
DCR_S2FV30_NOI	0.0965 ±0.0039	0.0967 ±0.0028	0.0968 ±0.0033
DCR_C1FV10_INT	0.0288 ±0.0038	0.0282 ±0.0042	0.0286 ±0.0039
DCR_C1FV10_NOI	0.0180 ±0.0040	0.0186 ±0.0040	0.0183 ±0.0038
DCR_C1FV30_NOI	0.0754 ±0.0056	0.0735 ±0.0046	0.0753 ±0.0068
DCR_C2FV30_NOI	0.0681 ±0.0011	0.0692 ±0.0010	0.0684 ±0.0008

Les tenseurs d'orientation des particules cylindriques sont représentés aux tables 5.9, 5.10, 5.11 et 5.12. Les quatre tenseurs indiquent une distribution isotrope de l'orientation des particules.

TABLE 5.9 – Tenseur d'orientation de DCR_C1FV10_INT

$$\begin{bmatrix} 0.339 \pm 0.0642 & -0.005 \pm 0.0486 & -0.003 \pm 0.054 \\ -0.005 \pm 0.0486 & 0.334 \pm 0.0683 & -0.001 \pm 0.052 \\ -0.003 \pm 0.0549 & -0.001 \pm 0.0525 & 0.326 \pm 0.058 \end{bmatrix}$$

TABLE 5.10 – Tenseur d'orientation de DCR_C1FV10_NOI

$$\begin{bmatrix} 0.324 \pm 0.084 & 0.005 \pm 0.062 & 0.003 \pm 0.069 \\ 0.005 \pm 0.062 & 0.335 \pm 0.083 & 0.008 \pm 0.066 \\ 0.003 \pm 0.069 & 0.008 \pm 0.066 & 0.339 \pm 0.084 \end{bmatrix}$$

TABLE 5.11 – Tenseur d'orientation de DCR_C1FV30_NOI

$$\begin{bmatrix} 0.349 \pm 0.037 & -0.004 \pm 0.032 & -0.024 \pm 0.039 \\ -0.004 \pm 0.032 & 0.326 \pm 0.029 & 0.009 \pm 0.036 \\ -0.024 \pm 0.039 & 0.009 \pm 0.036 & 0.324 \pm 0.050 \end{bmatrix}$$

TABLE 5.12 – Tenseur d'orientation de DCR_C2FV30_NOI

$$\begin{bmatrix} 0.338 \pm 0.009 & 0.008 \pm 0.030 & -0.006 \pm 0.024 \\ 0.008 \pm 0.030 & 0.356 \pm 0.022 & -0.008 \pm 0.045 \\ -0.006 \pm 0.024 & -0.008 \pm 0.045 & 0.305 \pm 0.029 \end{bmatrix}$$

5.2.2.2 Maillage

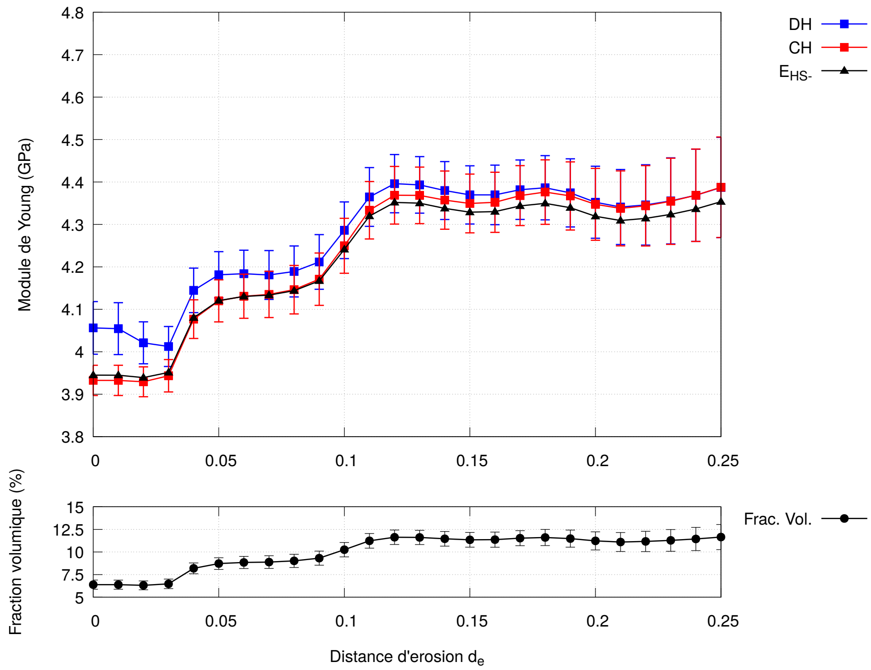
La fraction volumique de particules aux distances d'érosion de $d_e = 0.0$ et $d_e = 0.2$ et le nombre d'éléments de maillage sont répertoriés à la table 5.13. Les fractions volumiques à $d_e = 0.0$ sont nettement inférieures aux fractions volumiques cibles ce qui est attendu compte tenu de l'absence de particules au bord des VES. À $d_e = 0.2$, les fractions volumiques sont proches des fractions volumiques cibles. L'interdiction d'insérer une particule qui intersecte les bords du VES influence à la baisse le nombre d'éléments de maillage. En effet, la carte de taille n'a pas besoin d'être raffinée aux bords du cube puisqu'il n'y a pas de particules.

Table 5.13 – Fractions volumiques et nombre d'éléments de maillage

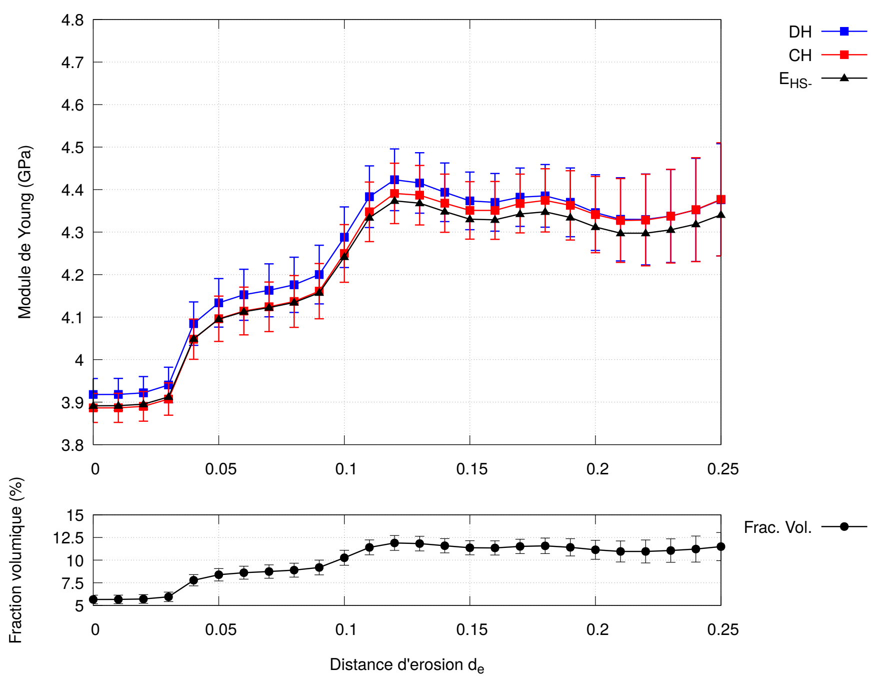
Nom	$f_{vol}^{quad}(\%)$		Nombre d'éléments
	$d_e = 0.0$	$d_e = 0.2$	
DCR_S1FV10_INT	6.39 ±0.51	11.23 ±1.00	33957 ±2337
DCR_S1FV10_NOI	5.66 ±0.47	11.14 ±1.05	30956 ±1788
DCR_S1FV30_NOI	15.84 ±0.53	34.12 ±0.57	163267 ±9048
DCR_S2FV30_NOI	19.35 ±0.47	32.87 ±0.90	377230 ±12601
DCR_C1FV10_INT	5.60 ±0.70	10.30 ±1.65	66780 ±11592
DCR_C1FV10_NOI	3.59 ±0.73	9.13 ±1.93	46525 ±9982
DCR_C1FV30_NOI	14.84 ±0.98	27.01 ±1.88	602604 ±51065
DCR_C2FV30_NOI	13.61 ±0.09	31.58 ±5.04	975795 ±19062

5.2.2.3 Modules d'élasticité apparents

Les figures 5.14 à 5.17 illustrent l'évolution des modules d'élasticité apparents E_{app} en fonction de la distance d'érosion d_e. La table 5.14 liste les E_{app} pour les VES érodés à une distance $d_e = 0.2$. Les bornes analytiques calculées selon la fraction volumique de particules après érosion. Tous les modules sont situés entre les bornes de Reuss, Voigt et d'Hashin-Shtrikman. Les écarts entre les E_{app} obtenus avec les conditions CLDH et CLCH sont très faibles. Comme pour les microstructures obtenues avec la méthode RSA, les modules d'élasticité en CLDH et CLCH convergent vers les mêmes valeurs plus la distance d'érosion augmente. La différence entre les résultats avec et sans intersections est faible et les écarts-types font en sorte que cette différence ne peut être clairement attribuée à la présence ou non de particules aux bords du VES. Les modules E_{app} calculés avec les microstructures de type DCR_S1FV10 et DCR_C1FV10 sont similaires à ceux calculés avec les microstructures RSA_S1FV10 et RSA_C1FV10 à $d_e = 0.2$ de la table 5.3. Les modules d'élasticité calculés pour les VES composés en volume de 30% de particules sont largement supérieurs à ceux obtenus pour la fraction volumique de 10%. Ces modules sont plus distants de la borne HS^- ce qui est attendu compte tenu de la fraction volumique élevée en particules.

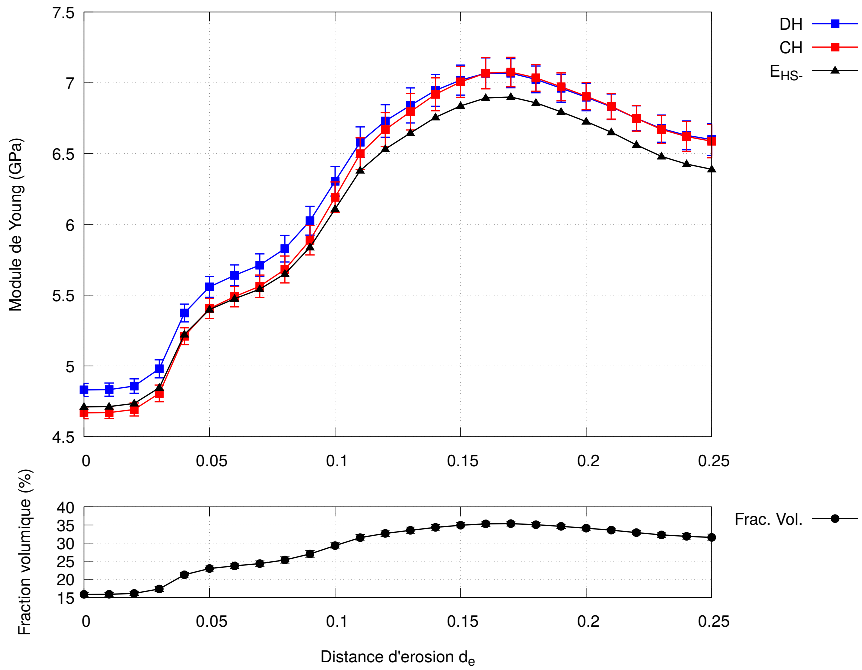


(a) DCR_S1FV10_INT

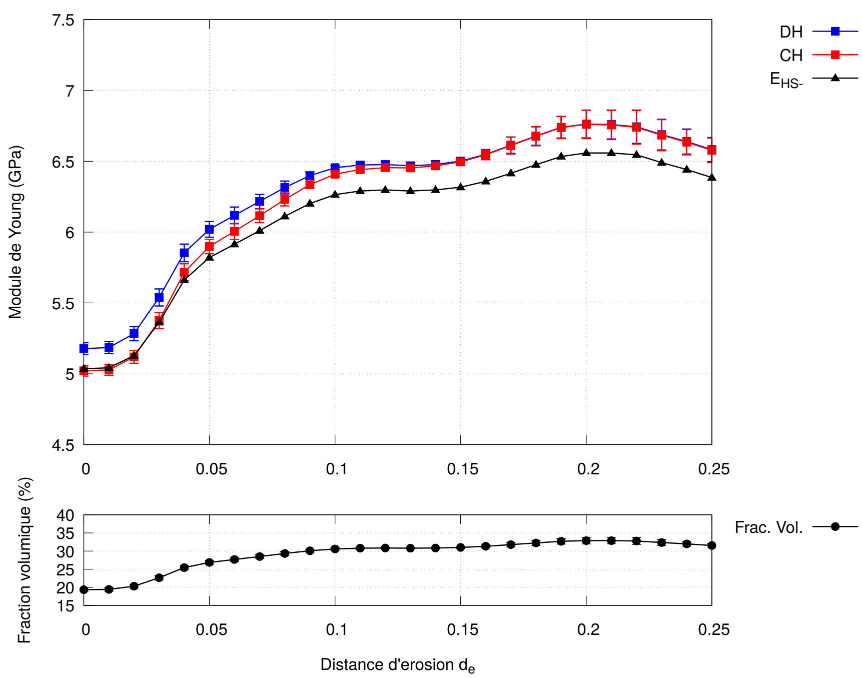


(b) DCR_S1FV10_NOI

FIGURE 5.14 – Variation des modules E_{app} en fonction de d_e. a) DCR_S1FV10_INT. b) DCR_S1FV10_NOI.

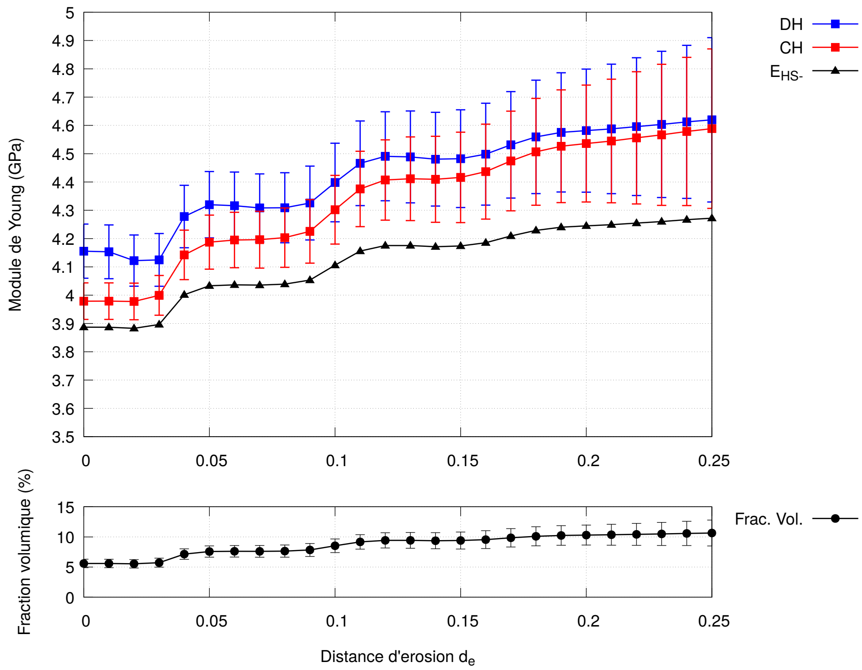


(a) DCR_S1FV30_NOI

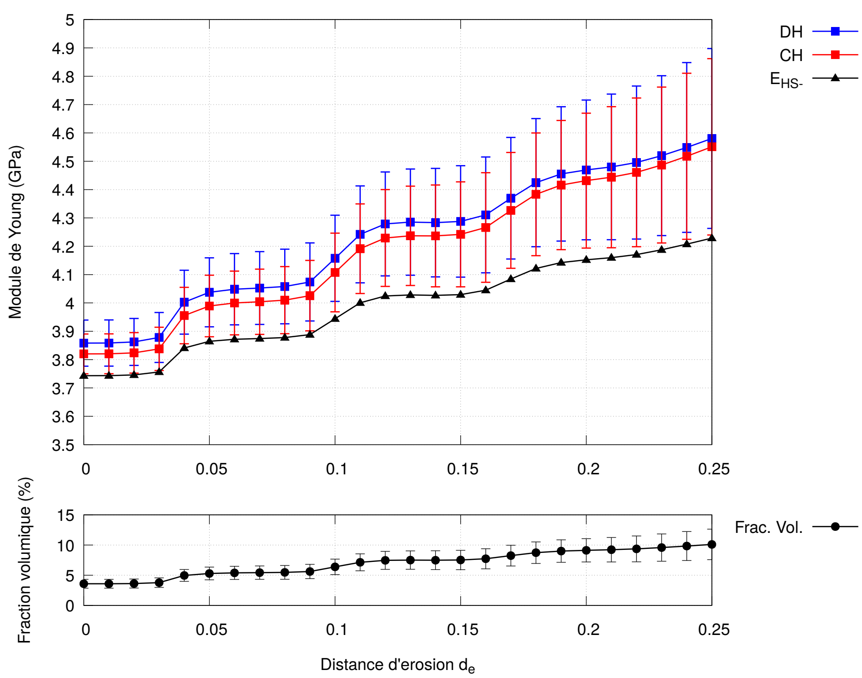


(b) DCR_S2FV30_NOI

FIGURE 5.15 – Variation des modules E_{app} en fonction de d_e. a) DCR_S1FV30_NOI. b) DCR_S2FV30_NOI.

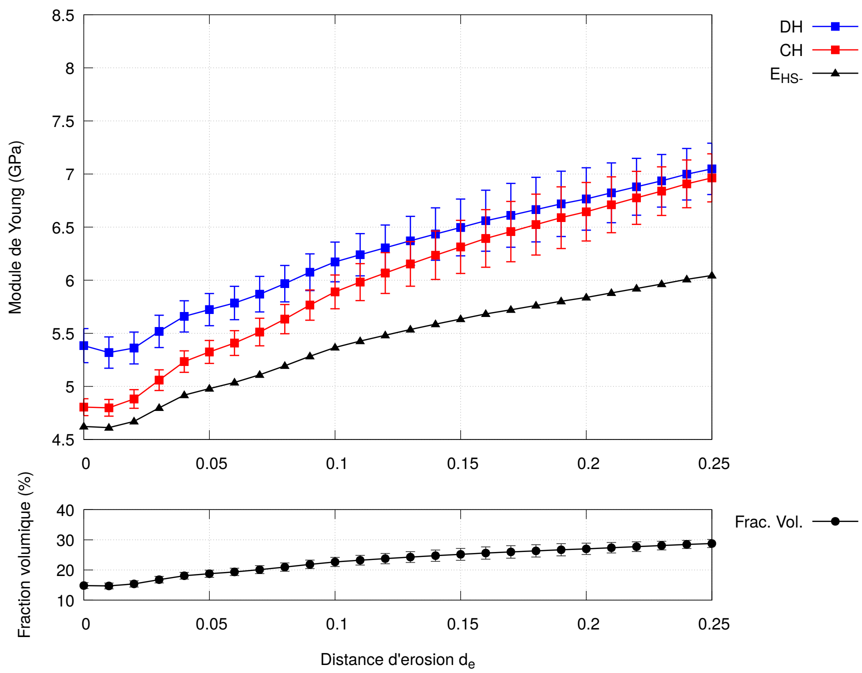


(a) DCR_C1FV10_INT

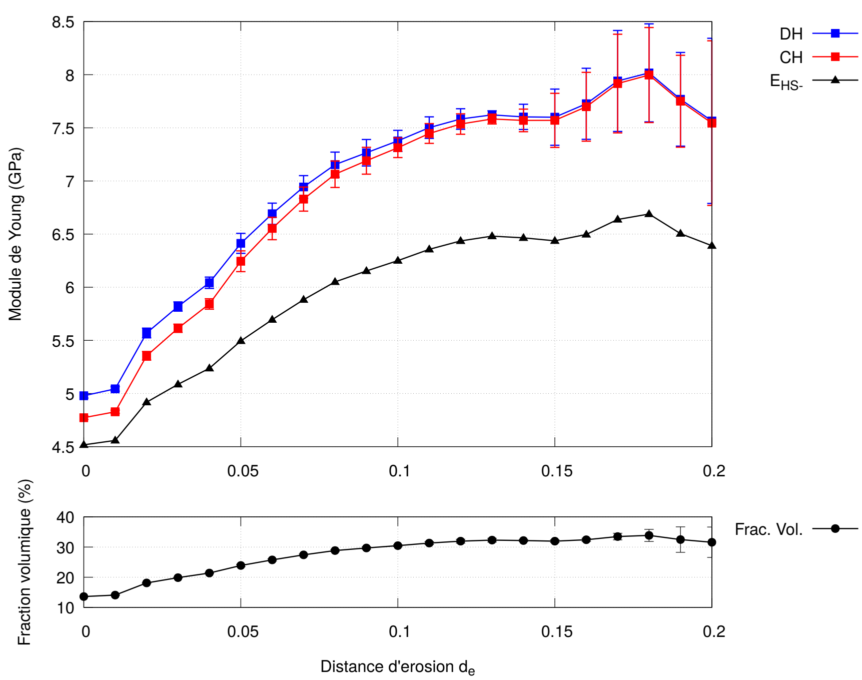


(b) DCR_C1FV10_NOI

FIGURE 5.16 – Variation des modules E_{app} en fonction de d_e. a) DCR_C1FV10_INT. b) DCR_C1FV10_NOI.



(a) DCR_C1FV30_NOI



(b) DCR_C2FV30_NOI

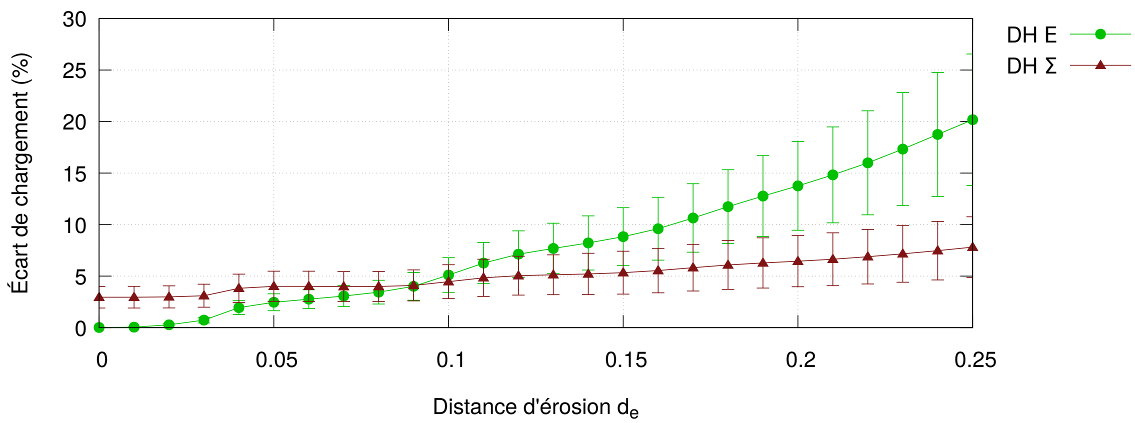
FIGURE 5.17 – Variation des modules E_{app} en fonction de d_e. a) DCR_C1FV30_NOI. b) DCR_C2FV30_NOI.

TABLE 5.14 – Module d'élasticité apparent E_{app} (GPa) pour la distance d'érosion $d_e = 0.2$

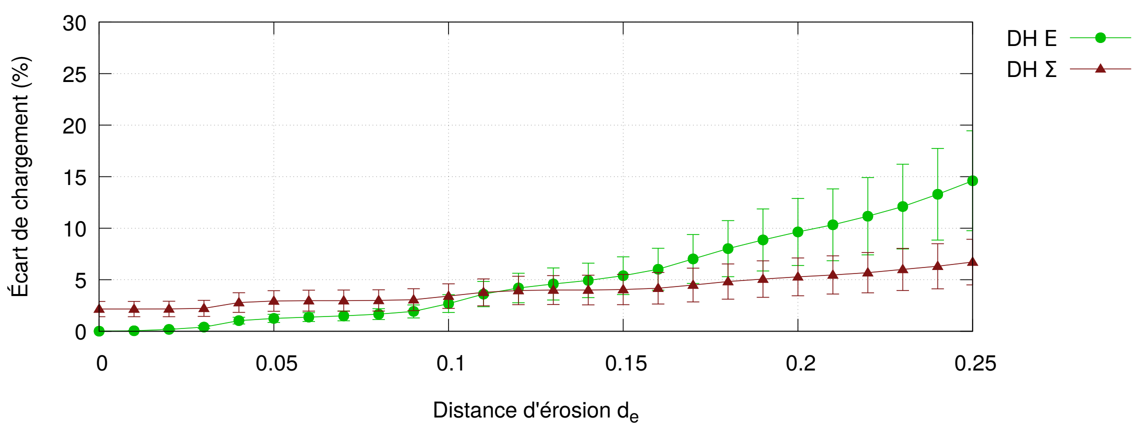
Nom	$f_{vol}(\%)$	Résultats numériques			Bornes analytiques			
		CLDH	CLCH	$\Delta(\%)$	Reuss	HS^-	HS^+	Voigt
DCR_S1FV10_INT	11.23 ±1.00	4.352 ±0.085	4.347 ±0.085	0.11	3.919	4.319	7.873	11.332
DCR_S1FV10_NOI	11.14 ±1.05	4.346 ±0.089	4.341 ±0.090	0.11	3.915	4.312	7.836	11.269
DCR_S1FV30_NOI	34.12 ±0.57	6.898 ±0.096	6.906 ±0.096	−0.10	5.183	6.725	18.332	27.083
DCR_S2FV30_NOI	32.87 ±0.90	6.763 ±0.098	6.760 ±0.101	0.04	5.093	6.558	17.693	26.224
DCR_C1FV10_INT	10.30 ±1.65	4.582 ±0.218	4.536 ±0.207	1.00	3.880	4.245	7.496	10.689
DCR_C1FV10_NOI	9.13 ±1.93	4.469 ±0.246	4.432 ±0.238	0.85	3.833	4.152	7.026	9.880
DCR_C1FV30_NOI	27.01 ±1.88	6.765 ±0.294	6.645 ±0.276	1.78	4.711	5.838	14.813	22.197
DCR_C2FV30_NOI	31.58 ±5.04	7.566 ±0.777	7.544 ±0.775	0.28	5.004	6.390	17.043	25.338

5.2.2.4 Influence de la distance d'érosion sur l'écart des chargements

Les écarts de chargements fonction de la distances d'érosion $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$, $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$, $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^D(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH et CLCH des microstructures de type DCR_C1FV10_INT et DCR_C1FV10_NOI sont illustrés aux figures B.23 à B.25. Les écarts des autres microstructures sont disponibles à l'annexe B.3. Il n'y a pas de distinction évidente entre l'évolution des écarts de chargements des microstructures dont les particules intersectent le bord du VES et ceux qui ne l'intersectent pas. Les écarts de chargements des microstructures générées par la méthode DCR sont semblables à ceux observés avec méthode RSA.

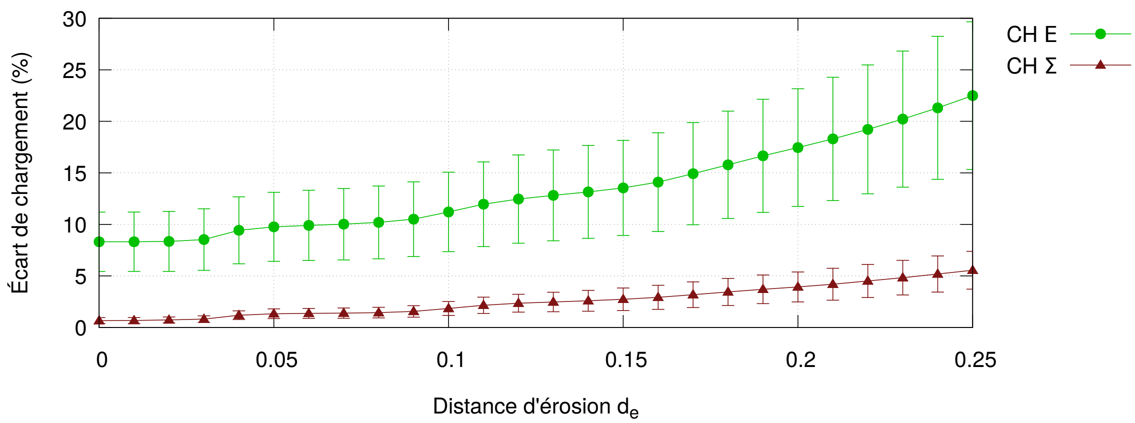


(a) DCR_C1FV10_INT

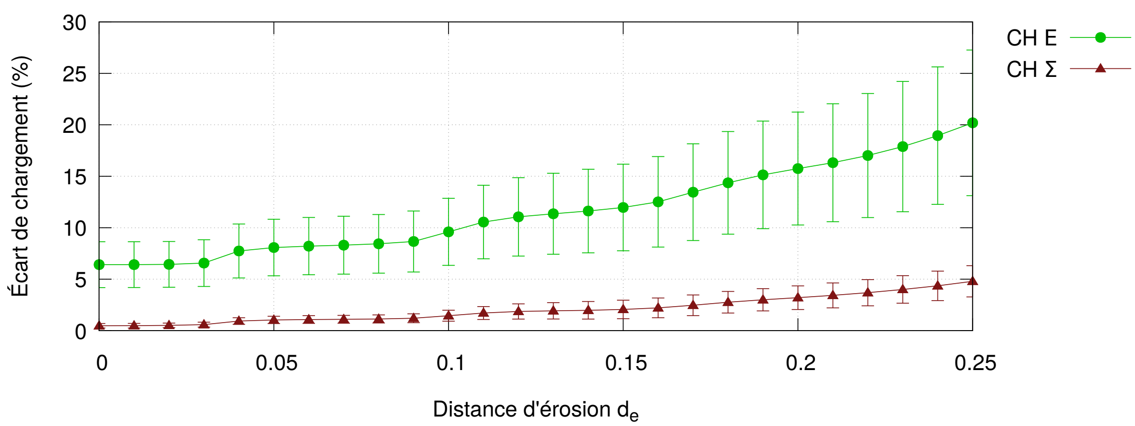


(b) DCR_C1FV10_NOI

FIGURE 5.18 – Illustration de l'écart des chargements sphériques $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH. a) DCR_C1FV10_INT. b) DCR_C1FV10_NOI.

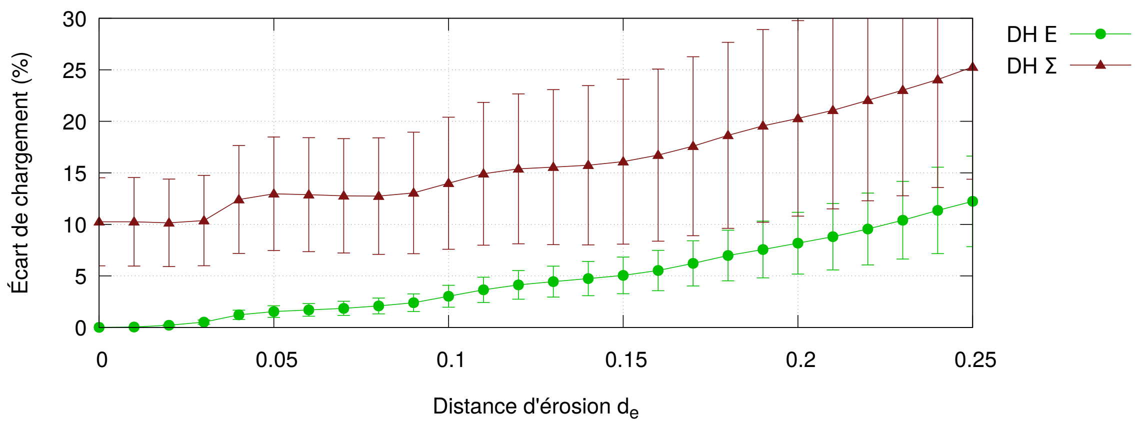


(a) DCR_C1FV10_INT

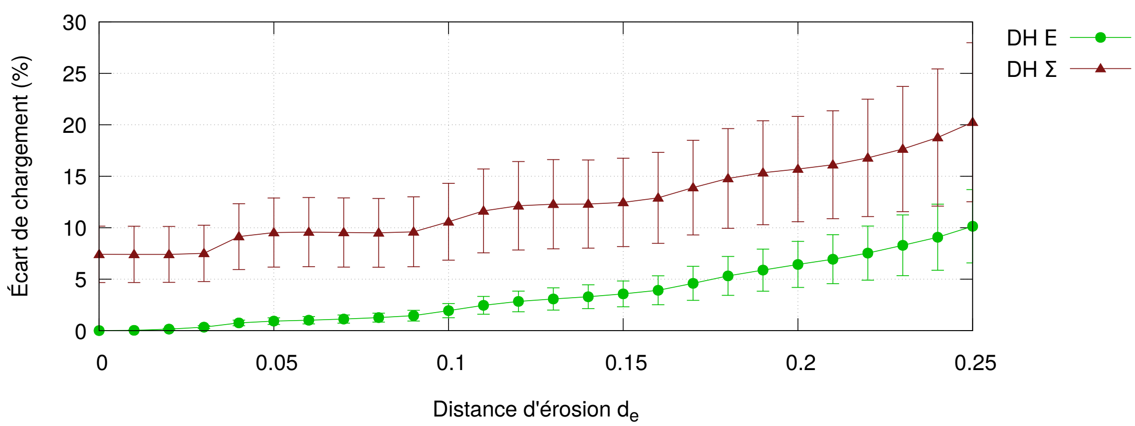


(b) DCR_C1FV10_NOI

FIGURE 5.19 – Illustration de l'écart des chargements sphériques $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLCH. a) DCR_C1FV10_INT. b) DCR_C1FV10_NOI.

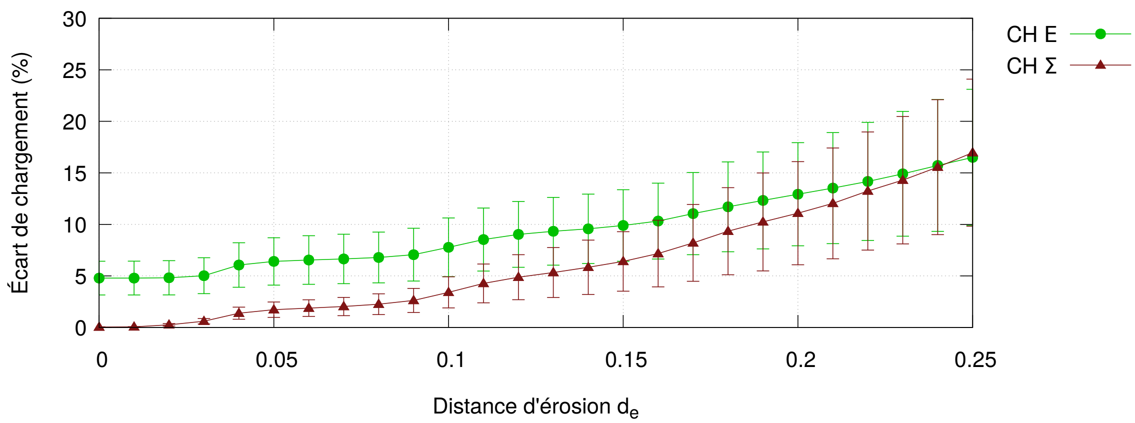


(a) DCR_C1FV10_INT

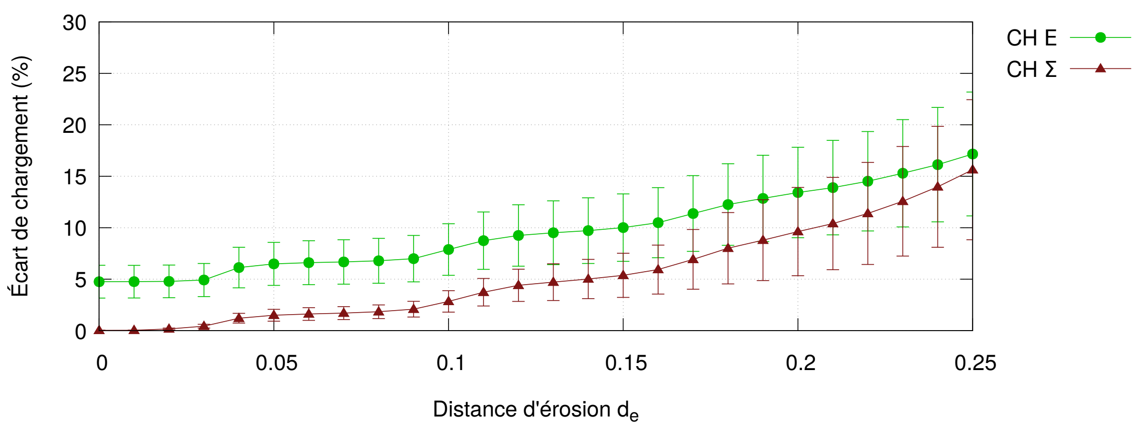


(b) DCR_C1FV10_NOI

FIGURE 5.20 – Illustration de l'écart des chargements déviatorique $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^D(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH. a) DCR_C1FV10_INT. b) DCR_C1FV10_NOI.



(a) DCR_C1FV10_INT

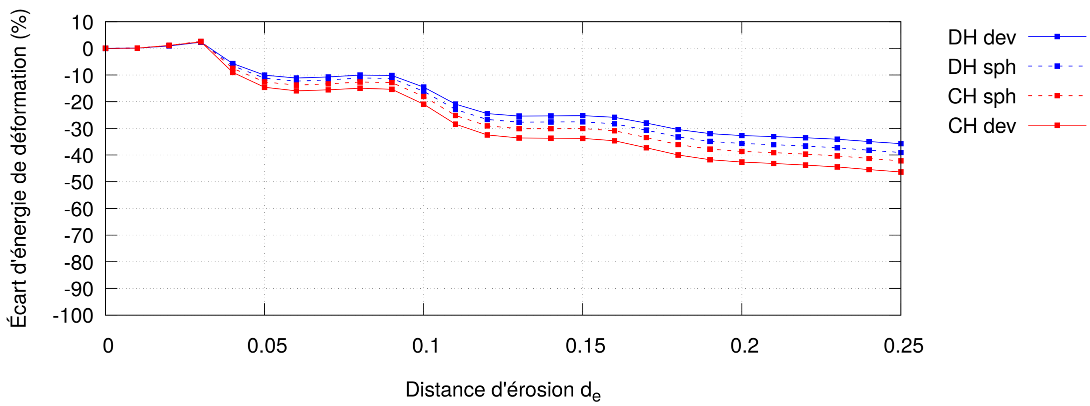


(b) DCR_C1FV10_NOI

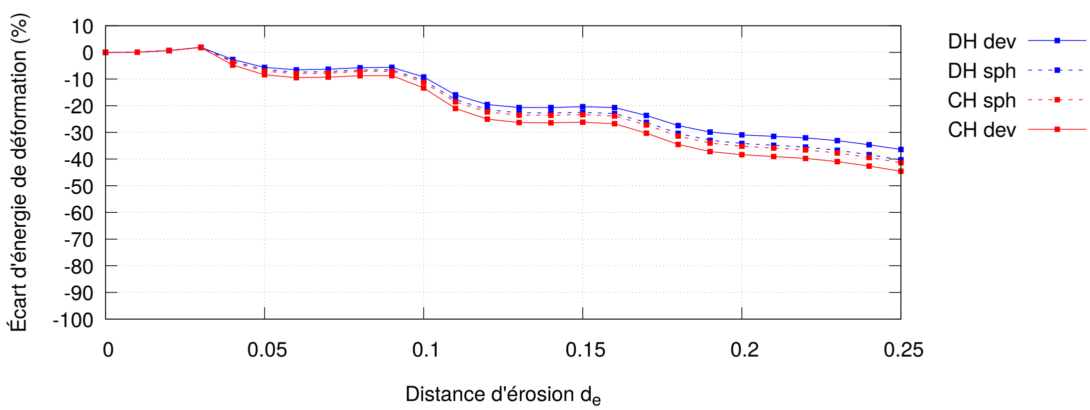
FIGURE 5.21 – Illustration de l'écart des chargements déviatorique $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^D(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLCH. a) DCR_C1FV10_INT. b) DCR_C1FV10_NOI.

5.2.2.5 Influence de la distance d'érosion sur l'écart en énergie de déformation

L'évolution de l'écart en énergie de déformation Δ^{ed} en fonction de d_e des microstructures DCR_C1FV10_INT et DCR_C1FV10_NOI est illustrée à la figure 5.22 et celle des autres microstructures sont disponibles à l'annexe B.4. L'influence de le la présence ou non de particules au bord du VES sur Δ^{ed} est très faible. Contrairement aux résultats obtenus avec la méthode RSA, Δ^{ed} n'atteint pas un plateau à $d_e = 0.2$ pour les microstructures FV10. Cette évolution est aussi observée au niveau de la fraction volumique de particules qui est illustrée au bas des figures 5.15 à 5.17. À la différence des microstructures générées par la méthode RSA, la fraction volumique augmente légèrement entre $d_e = 0.15$ et $d_e = 0.25$. Cette augmentation pourrait être la cause de la variation de Δ^{ed} à $d_e = 0.2$.



(a) DCR_C1FV10_INT



(b) DCR_C1FV10_NOI

FIGURE 5.22 – Illustration de la variation de l'écart en énergie de déformation Δ^{ed} en fonction de d_e. a) DCR_C1FV10_INT. b) DCR_C1FV10_NOI.

5.2.2.6 Influence de la distance d'érosion sur l'écart entre le travail macroscopique et la moyenne volumique du travail mésoscopique

L'écart entre le travail macroscopique et la moyenne volumique du travail mésoscopique en fonction de la distance d'érosion $\Delta^{Hill}(d_e)$ demeure en dessous de $\pm 5\%$ pour toutes les microstructures. La condition de macro-homogénéité de Hill est donc approximativement respectée.

5.3 Discussion sur la méthode d'érosion et sur la génération par la méthode DCR

La méthode d'érosion a pour objectif de limiter les effets de bord. Les effets de bord proviennent des conditions aux limites et de la répartition spatiale des particules. Les effets engendrés par les CLs homogènes sont causés par l'hétérogénéité du contour du VES qui provoque des perturbations dans les champs locaux. L'utilisation de CLs périodiques permet d'atténuer ces perturbations, mais impose d'office que la structure macroscopique du matériau soit composée d'un arrangement périodique du VES. Ce n'est pas le cas des matériaux hétérogènes à particules disposés aléatoirement. Les effets de bord causés par la répartition des particules sont expliqués par le fait que la répartition n'est pas la même au bord du VES qu'au centre compte tenu des critères d'insertion des particules. Les critères d'insertion ne peuvent pas être contournés, car ils assurent la bonne qualité et la convergence du maillage.

La méthode d'érosion est une réponse à cette double problématique d'effets de bord. L'érosion du VES permet d'effectuer l'homogénéisation à partir des champs suffisamment loin des bords du VES pour éviter les effets des CLs et de la répartition des particules. En choisissant une distance d'érosion suffisamment grande pour éviter les effets de bord et suffisamment petite pour éviter les écarts de chargements, il est possible de resserrer l'écart entre les résultats obtenus avec les conditions CLDH et CLCH ou les conditions CLF et CLG (résultats non détaillés dans ce chapitre).

Ainsi, la méthode d'érosion permet de générer fidèlement des microstructures à fraction volumique élevée en particules qui ne pourraient être modélisées autrement compte tenu des critères d'insertions des particules. Sa mise en application est simple et ne nécessite aucune modification au niveau du modèle géométrique, du maillage EF de la microstructure et de la génération du modèle EF puisque c'est une méthode d'analyse de resultats de la MEF.

La méthode d'érosion rend possible l'utilisation de la dynamique des corps rigides comme méthode de génération des microstructures. La méthode DCR est en mesure de positionner des particules très élancées qui ne pourraient être disposées convenablement avec la méthode RSA. En effet, la force de cette méthode est sa capacité à bouger les particules afin de les entasser tout en évitant les chevauchements. La principale limitation de la méthode DCR est la difficulté d'insérer les particules aux bords du VES qui ne répondent pas aux critères d'insertion. Les conséquences de cette limitation sont minimisées par l'utilisation de la méthode d'érosion.

Chapitre 6

Étude mécanique et thermique d'un composite chaux - chanvre

Afin de confronter la nouvelle approche de modélisation des matériaux hétérogènes avec des données expérimentales, une étude d'un composite constitué de particules de chanvre et d'une matrice de chaux hydratée est réalisée.

Le béton de chanvre est un matériau composite constitué de particules de chènevotte liées par une matrice de chaux hydratée. Ce matériau de construction à l'avantage d'être un bon isolant thermique et son cycle de vie est favorable au développement durable. Son utilisation dans le domaine de la construction résidentielle et commerciale est récente et suscite beaucoup d'engouement. L'une des principales contraintes à l'adoption de ce type de matériau est le faible niveau de caractérisation de ce type de composite. Les particules végétales ont une faible conductivité thermique et une faible rigidité tandis que la matrice de chaux à une conductivité thermique plus élevée (contraste de 5 à 10) et une rigidité élastique environ mille fois plus importante que la chènevotte. Il faut donc avoir recours aux essais en laboratoire pour connaître le comportement thermomécanique du matériau. Cependant, ces essais nécessitent souvent beaucoup de temps compte tenu de la durée de carbonatation qui donne à la matrice sa rigidité. En effet, la carbonatation peut prendre jusqu'à 180 jours avant d'être complète. La modélisation numérique de ce type de matériau est donc une solution pertinente.

Cette étude est basée sur les essais expérimentaux effectués dans le cadre de la thèse de T. H. Pham [78] réalisée à l'Université de Bretagne-Sud. La section 6.2 présente le plan d'expériences de l'étude numérique et les résultats sont analysés et comparés aux résultats expérimentaux à la section 6.3. Finalement, une discussion sur l'apport de la démarche de modélisation numérique basée sur l'approche intégrée CAO-MEF dans le contexte du composite chaux-chanvre est présentée à la section 6.4.

6.1 Propriétés des constituants et formulation du composite

Les particules de chanvre sont issues de la partie boisée de la tige de chanvre (Fig. 6.1) et sont obtenues par broyage. Ces particules ont un élancement moyen de $L/D = 7/2$ (longueur / diamètre). La conductivité thermique des particules identifiée par Pham et al. [78] est de $\lambda_{\mathcal{P}} = 0.07\, Wm^{-1}K^{-1}$ et est considérée comme étant isotrope. Le module d'élasticité des particules vaut environ $E_{\mathcal{P}} = 1$ MPa avec un coefficient de Poisson de $\nu_{\mathcal{P}} = 0.1$ [78].

(a) (b)

FIGURE 6.1 – a) Tige de chanvre. b) Particules de chanvre [79]

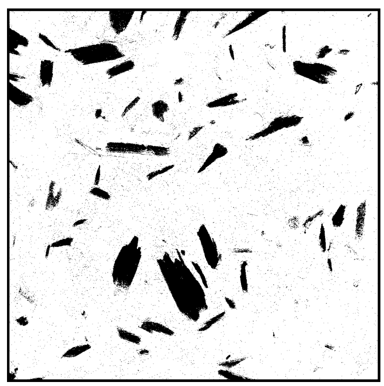
La matrice cimentaire est constituée à 70% de chaux aérienne et de particules fines pouzzolaniques (Tradical PF70). Le rapport massique d'eau sur chaux est de 0.5. La conductivité thermique de la pâte de chaux sans particules après une période de vieillissement de 90 jours est de $\lambda_{\mathcal{P}} = 0.38\ Wm^{-1}K^{-1}$, le module d'élasticité de $E_{\mathcal{P}} = 5860$ MPa et le coefficient de Poisson de $\nu_{\mathcal{P}} = 0.172$.

Des échantillons de composites chaux-chanvre ont été réalisés avec des fractions volumiques de particules allant de 5% à 30%. La table 6.1 répertorie chaque type d'échantillon selon sa fraction volumique de particules.

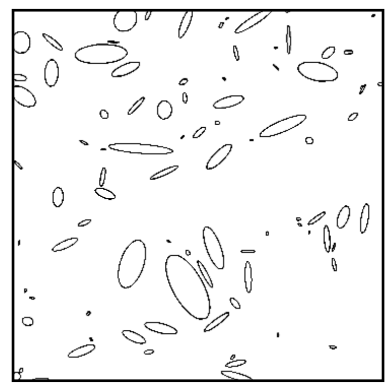
L'eau et la chaux sont mélangées dans un mélangeur vertical pour former une gâchée. Pendant ce temps, les particules de chanvre sont immergées dans l'eau pendant 2 minutes afin de limiter l'absorption de l'eau de la gâchée. Les particules sont mélangées à la gâchée de façon à distribuer aléatoirement leurs orientations. Des éprouvettes prismatiques de 130x130x50 mm^3 sont élaborées puis placées en cure pendant 28 jours.

Ensuite les éprouvettes sont séchées à 60 degrés Celsius dans une étuve. Une éprouvette de chaque type de composite est coupée et polie dans les trois directions orthogonales afin de visualiser la répartition des particules. La figure 6.2a illustre une coupe réalisée sur une éprouvette. Un traitement d'image (Fig. 6.2b) est réalisé afin de déterminer les ellipses englobant les particules (Fig. 6.2c). À partir de l'orientation ces ellipses, et pour chaque coupe orthogonale, le tenseur d'orientation 2D des particules est calculé. Il est montré que l'orientation des particules est globalement isotrope.

(a)



(b)



(c)

FIGURE 6.2 – Coupe d'un échantillon du composite chaux-chanvre. a) Image scannée de la coupe. b) Traitement d'image. c) Détection des ellipsoïdes [78].

La conductivité thermique des éprouvettes est mesurée à l'aide du montage expérimental de la plaque chaude gardée (PCG) [80] en régime stationnaire. Les conductivités thermiques pour chaque type d'éprouvette sont répertoriées à la table 6.1. Le module d'élasticité est évalué à l'aide d'un essai de compression uniaxiale sur des éprouvettes vieillies pendant 90 jours (Table 6.1).

TABLE 6.1 – Liste des éprouvettes de composites chaux-chanvre. Valeurs expérimentales de conductivité thermique et module d'élasticité

Nom	f_{vol} (%)	λ ($W.m^{-1}.K^{-1}$)	E (GPa)
EXP_Chaux	0.0 ±0.0	0.385 ±0.002	5.80 ±0.41
EXP_CCFV04	4.5 ±0.5	0.352 ±0.005	5.15 ±0.20
EXP_CCFV09	9.0 ±1.0	0.330 ±0.015	4.60 ±0.38
EXP_CCFV13	13.5 ±1.5	0.306 ±0.012	4.01 ±0.27
EXP_CCFV18	18.5 ±2.0	0.281 ±0.014	3.80 ±0.29
EXP_CCFV27	27.0 ±2.0	0.239 ±0.011	2.55 ±0.25

6.2 Plan d'expériences numérique

L'étude numérique qui suit vise à reproduire les essais expérimentaux en calculant la conductivité thermique et le module d'élasticité de VES constitués des mêmes proportions de particules que les éprouvettes. Les VES sont de forme cubique unitaire (arête a) et les particules sont considérées comme étant de forme cylindrique avec un ratio $L/D = 7/2$ et $D/a = 0.085$. Les particules sont distribuées de façon aléatoire dans le VES à l'aide de la méthode DCR en autorisant les intersections avec les bords et les VES sont érodés. La table 6.2 liste les différents types d'échantillons numériques. Les propriétés des constituants utilisés lors des simulations sont répertoriées à la table 6.3. Les VES sont soumis aux conditions aux limites de type CLDH et CLCH en chargement sphérique et déviatorique afin de déterminer le module d'élasticité apparent et aux conditions aux limites de type CLG et CLF indépendamment selon les trois axes principaux pour déterminer la conductivité thermique apparente. Le comportement du composite chaux-chanvre est considéré comme étant isotrope.

TABLE 6.2 – Liste des types de VES de composite chaux-chanvre

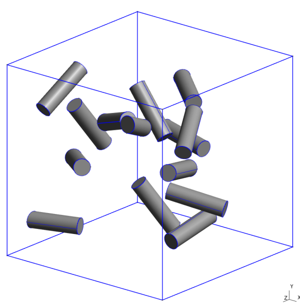
Nom	$f_{vol_{cible}}$ (%)	Nombre de VES
DCR_CCFV04	4.5	20
DCR_CCFV09	9.0	20
DCR_CCFV13	13.5	20
DCR_CCFV18	18.5	20
DCR_CCFV30	30	5

TABLE 6.3 – Propriétés des constituants

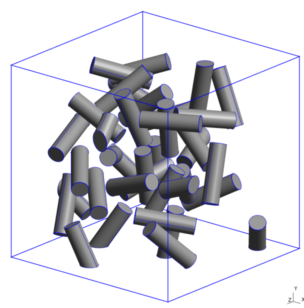
Constituants	$E(MPa)$	ν	$\lambda(W.m^{-1}.K^{-1})$
Particules - Chanvre	1.0	0.1	0.07
Matrice - Chaux	5860.0	0.172	0.38

6.3 Analyse des résultats avec la méthode d'érosion

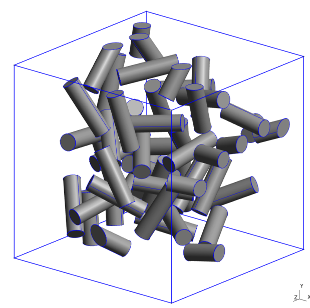
La figure 6.3 illustre les modèles BREP de chaque type d'échantillon numérique. Les centres de masse des particules de chaque configuration sont au centre du cube unitaire et les moments quadratiques par rapport aux axes principaux sont égaux pour chaque axe. Le tenseur d'orientation des différentes configurations indique que la distribution de l'orientation des particules est isotrope. La table 6.4 répertorie le nombre de particules pour chaque type d'échantillon et la fraction volumique de particules des VES érodés pour une distance d'érosion $d_e/a = 0.15$. Les fractions volumiques obtenues après l'érosion reflètent bien celles obtenues expérimentalement.



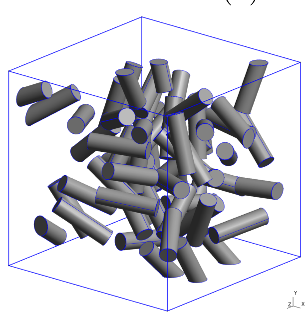
(a) DCR_CCFV04



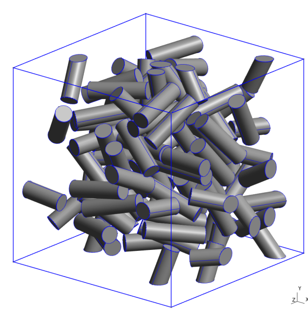
(b) DCR_CCFV09



(c) DCR_CCFV13



(d) DCR_CCFV18



(e) DCR_CCFV30

FIGURE 6.3 – Modèles BREP des échantillons numériques

TABLE 6.4 – Nombre de particules et fraction volumique de particules pour $d_e/a = 0.15$

Nom	Nombre de particules	$f_{vol_{d_e=0.15}}$ (%)
DCR_CCFV04	15 ±3	3.89 ±0.82
DCR_CCFV09	34 ±4	9.56 ±1.16
DCR_CCFV13	48 ±3	14.19 ±0.83
DCR_CCFV18	62 ±5	17.90 ±0.74
DCR_CCFV30	107 ±7	29.51 ±1.43

6.3.1 Conductivité thermique apparente des composites

Les conductivités thermiques apparentes en CLF et CLG en fonction de la distance d'érosion d_e sont illustrés aux figures 6.4 à 6.8. Les bornes HS^-, HS^+ et de Voigt sont également illustrées. Dans tous les cas, les conductivités thermiques sont situées à l'intérieur des bornes HS^- et HS^+. Initialement, les conductivités thermiques en CLF et CLG sont très proches et leur écart diminue rapidement selon d_e. Le phénomène d'évolution de la fraction volumique en forme d'escalier mentionné à la section 5.2.1.1 est facilement observable et diminue plus si la fraction volumique cible augmente.

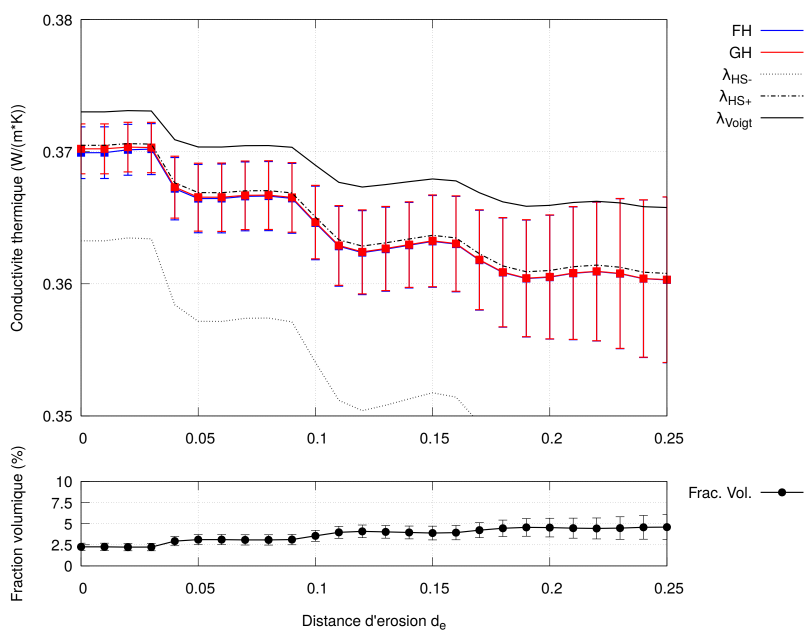


FIGURE 6.4 – Illustration de la variation des conductivités thermiques λ_{app} en fonction de d_e pour DCR_CCFV04

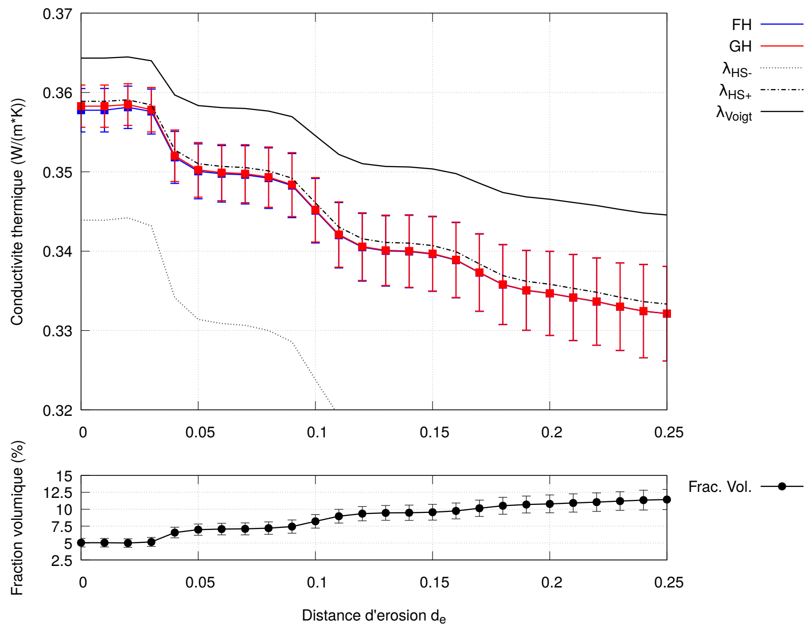


FIGURE 6.5 – Variation des conductivités thermiques λ_{app} en fonction de d_e pour DCR_CCFV09

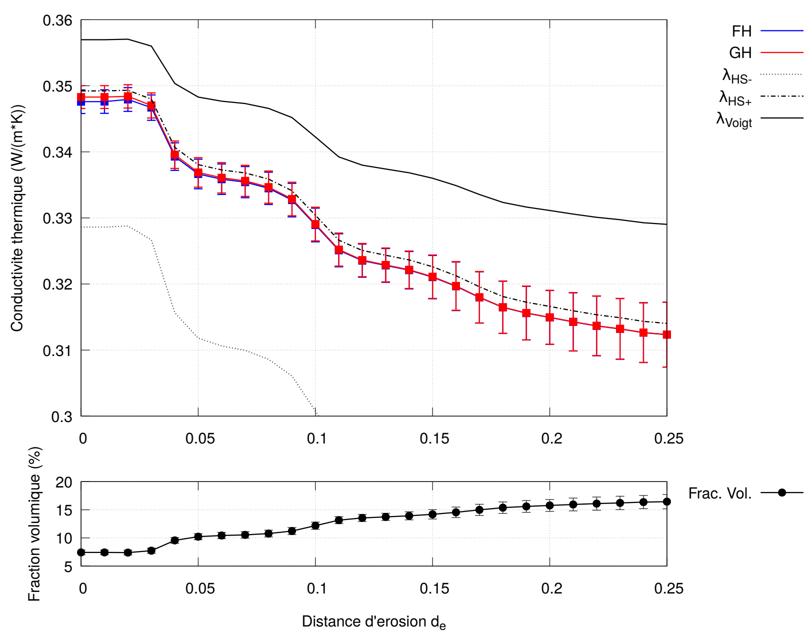


FIGURE 6.6 – Variation des conductivités thermiques λ_{app} en fonction de d_e pour DCR_CCFV13

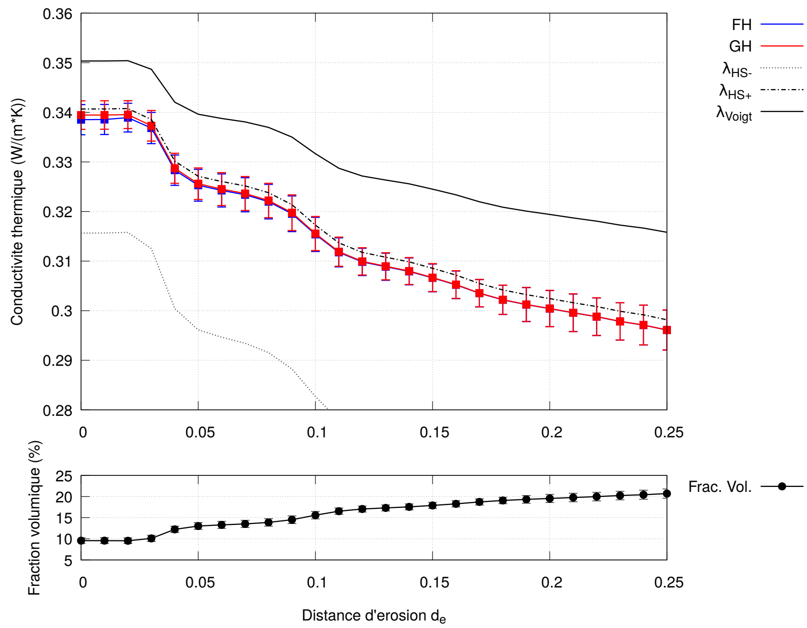


FIGURE 6.7 – Variation des conductivités thermiques λ_{app} en fonction de d_e pour DCR_CCFV18

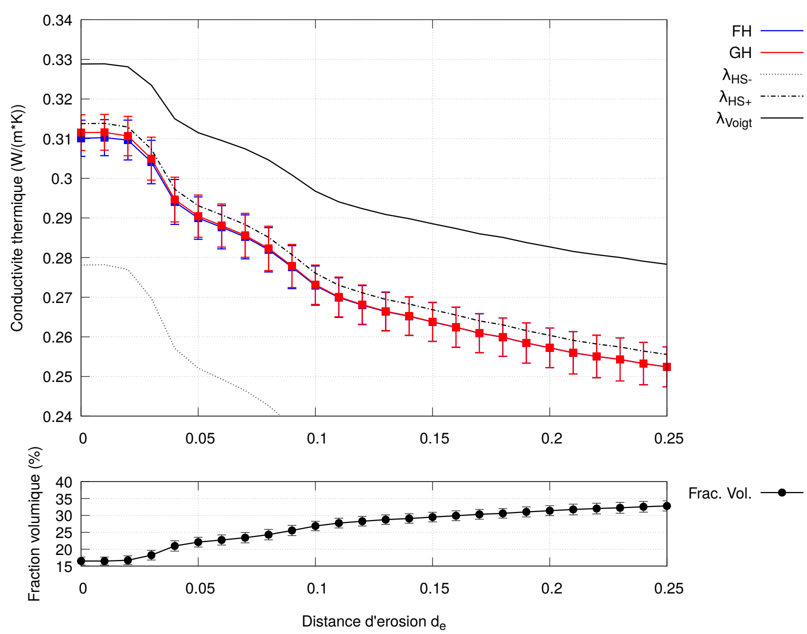


FIGURE 6.8 – Variation des conductivités thermiques λ_{app} en fonction de d_e pour DCR_CCFV30

La figure 6.9 illustre les conductivités thermiques apparentes obtenues pour l'ensemble des VES. Les résultats numériques ne correspondent pas exactement aux données expérimentales, ceux-ci étant plus faibles pour une fraction volumique donnée. Deux explications pourraient justifier cet écart. D'une part, la conductivité thermique des particules de chanvre est basée sur une méthode d'identification inverse et est considérée comme étant isotrope. Or, les particules de chanvre sont issues de microstructures composées de tiges élancées. La conductivité transverse des particules pourrait être différente de la conductivité longitudinale. Cette différence est soulignée par [81, 82]. D'autre part, il est possible que lors du processus d'incorporation des particules de chanvre à la gâchée, une quantité supérieure d'air ait été emprisonnée sous forme de porosités. Ces porosités présentes en moins grand volume dans la gâchée seule auraient un effet isolant sur le matériau ce qui pourrait aussi justifier la différence avec les résultats numériques. Cela pourrait aussi expliquer la différence des résultats numériques et expérimentaux avec l'augmentation de la fraction volumique de chanvre.

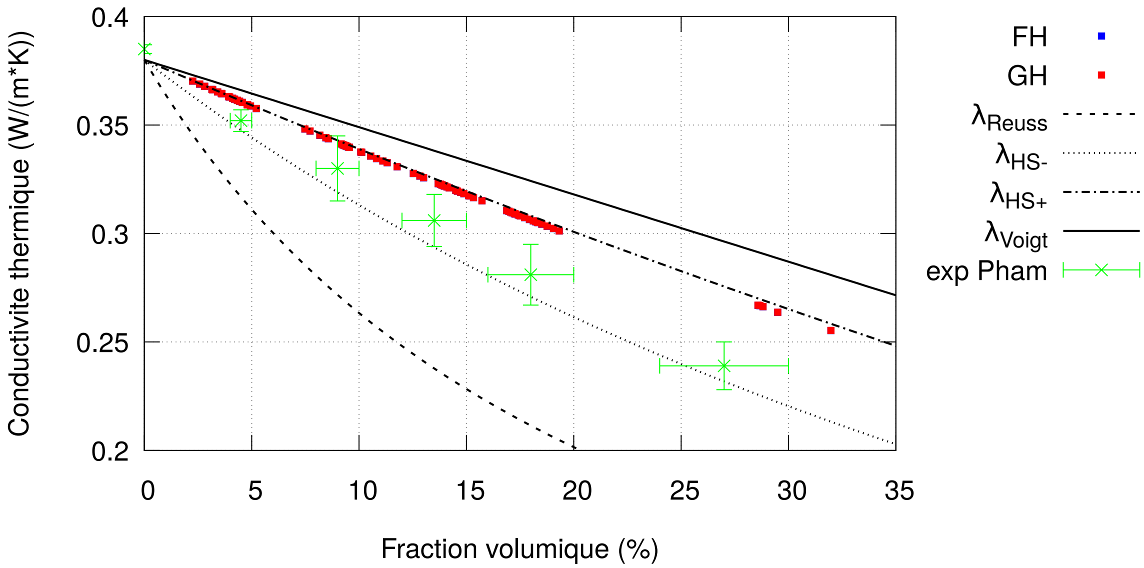


FIGURE 6.9 – Conductivité thermique apparente et mesures expérimentales

6.3.2 Module d'élasticité

Les modules d'élasticité apparents en fonction de la distance d'érosion en CLDH et CLCH sont illustrés aux figures 6.10 à 6.14 avec les bornes HS^{+} et de Voigt. Les bornes HS^{-} et de Reuss ne sont pas présentées puisqu'elles sont très faibles. Contrairement aux résultats obtenus avec le composite verre/epoxy, les modules d'élasticité sont proches de la borne HS^{+} puisque la matrice est beaucoup plus rigide que les particules de chènevotte. Malgré l'écart important qui sépare les modules d'élasticité en CLDH et

CLCH pour $d_e = 0.0$, ces deux modules convergent et leur écart devient très faible à $d_e = 0.15$.

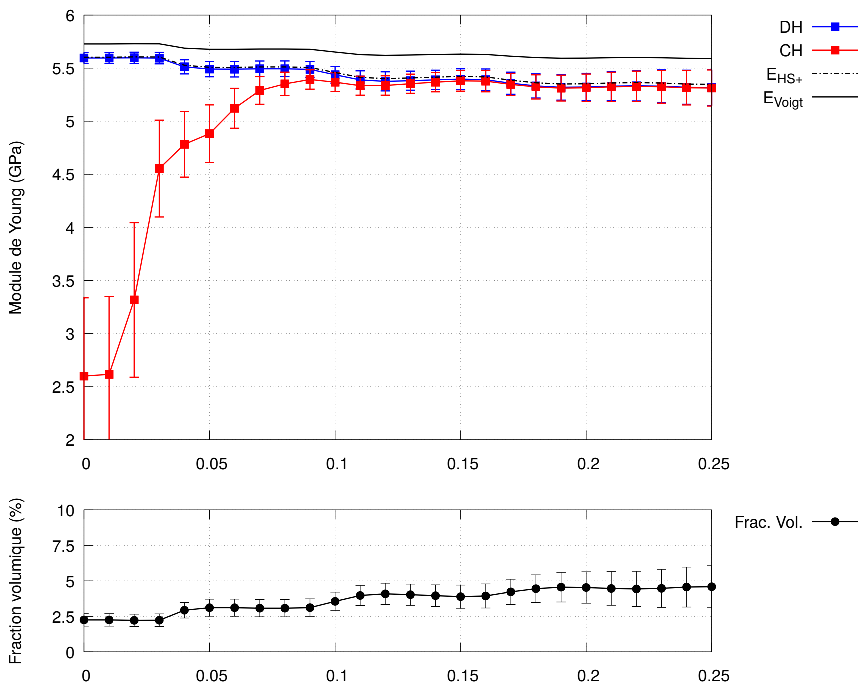


FIGURE 6.10 – Variation des modules E_{app} en fonction de d_e pour DCR_CCFV04

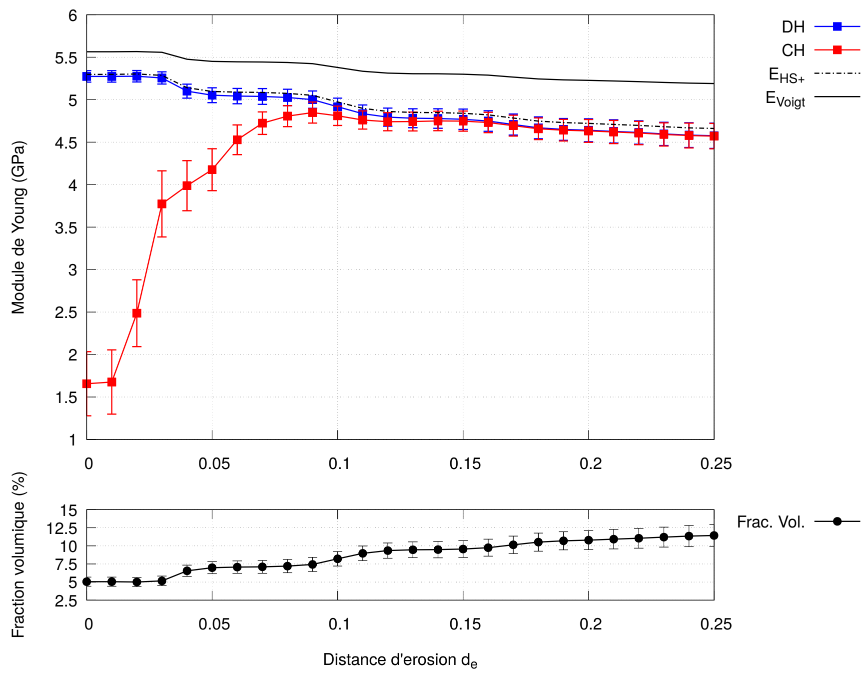


FIGURE 6.11 – Variation des modules E_{app} en fonction de d_e pour DCR_CCFV09

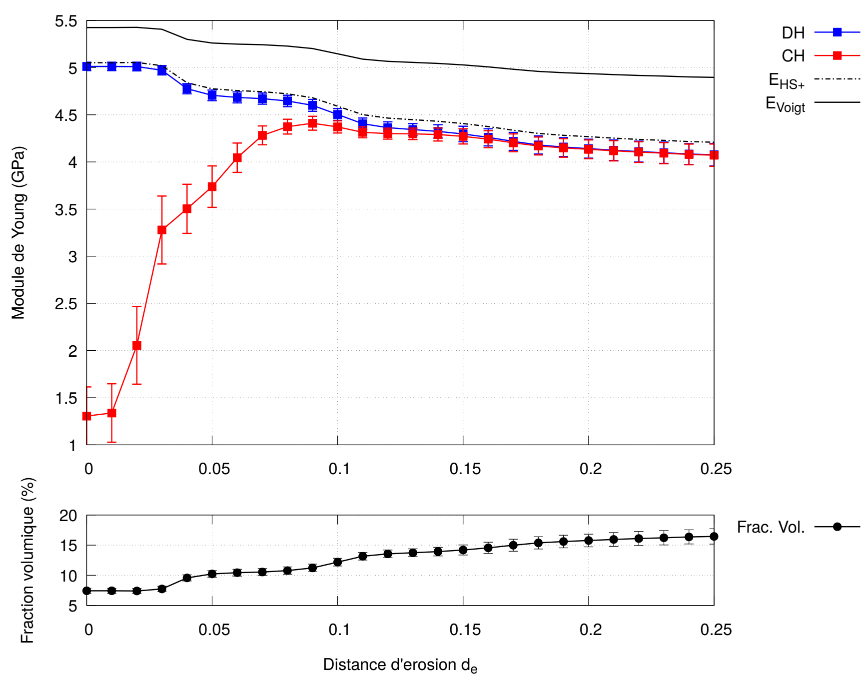


FIGURE 6.12 – Variation des modules E_{app} en fonction de d_e pour DCR_CCFV13

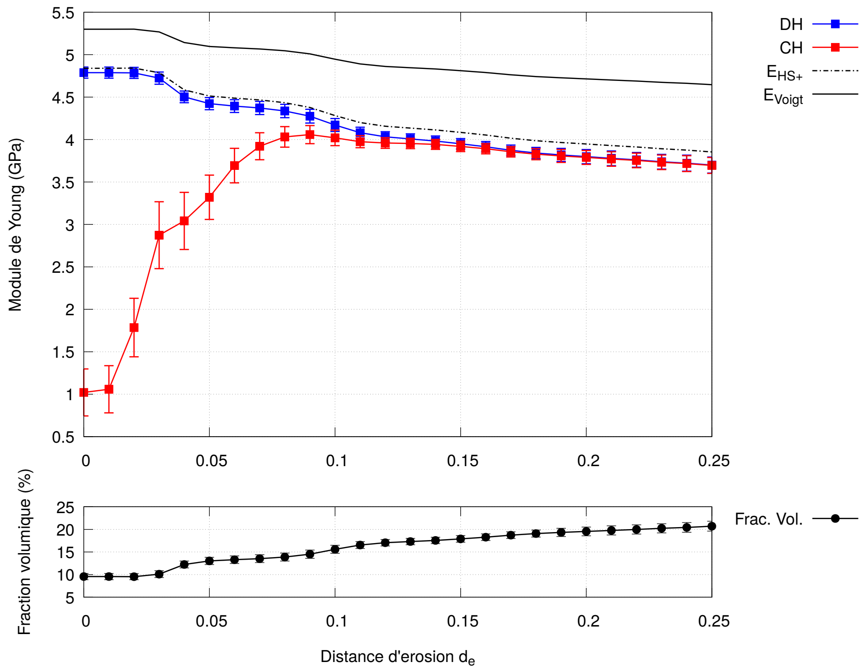


FIGURE 6.13 – Variation des modules E_{app} en fonction de d_e pour DCR_CCFV18

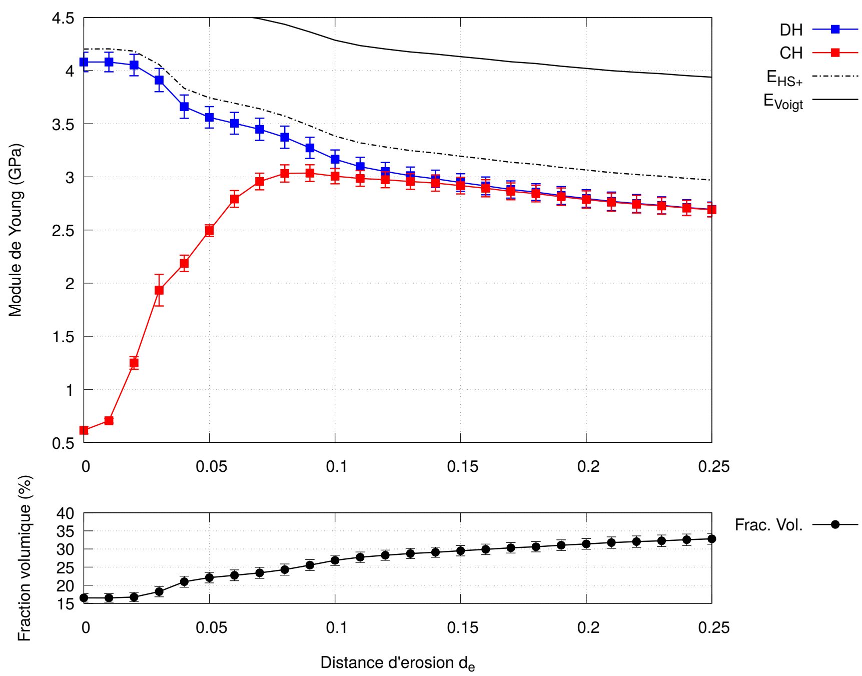


FIGURE 6.14 – Variation des modules E_{app} en fonction de d_e pour DCR_CCFV30

La figure 6.15 illustre les valeurs des modules d'élasticité apparents obtenues pour l'ensemble des VES. Contrairement aux résultats en conductivité thermique, les modules d'élasticité apparents sont proches des mesures expérimentales bien que supérieurs. Certains des résultats numériques entrent $f_{vol} = 4.5\%$ et $f_{vol} = 18\%$ sont compris dans l'intervalle d'incertitude des résultats expérimentaux. Cependant, les résultats à $f_{vol} = 30\%$ sont plus loin des valeurs réelles. La présence de porosité pourrait être à l'origine de cet écart. Aussi, les particules de chanvre, lors de leur incorporation à la gâchée, pourraient avoir absorbé davantage d'eau ce qui aurait un effet négatif sur la rigidité du composite.

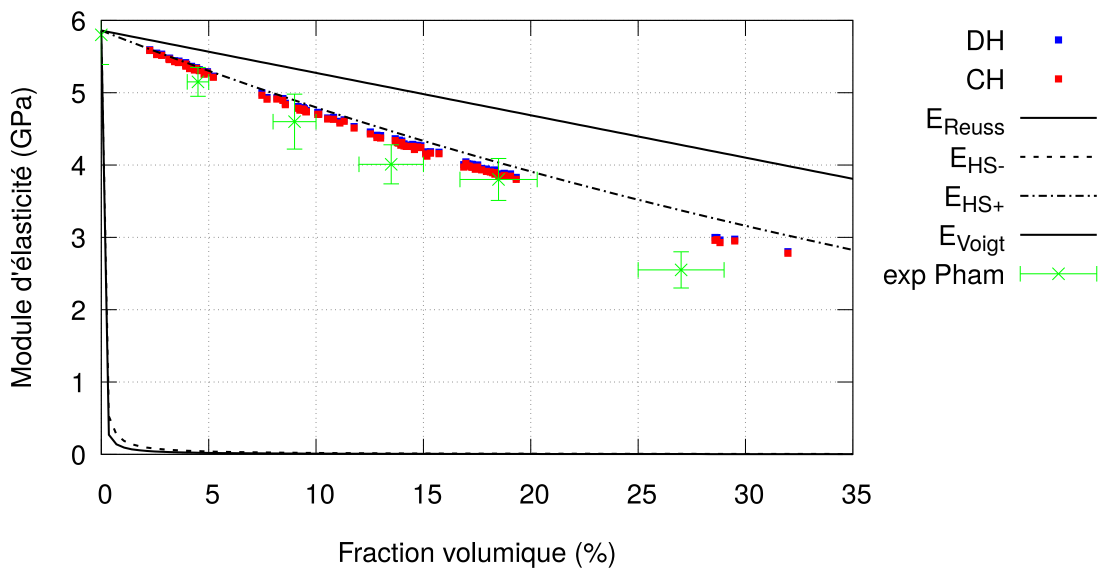


FIGURE 6.15 – Illustration des modules d'élasticité apparents et mesures expérimentales

6.4 Discussion sur l'apport de la méthode de modélisation numérique

Dans cette étude, la modélisation numérique du composite chaux-chanvre considère que le comportement thermomécanique des particules est isotrope, que la cohésion particule / matrice est parfaite et néglige la présence de porosités. Les conductivités thermiques obtenues numériquement selon ces hypothèses sont supérieures à celles mesurées expérimentalement. Les modules d'élasticité apparents sont proches des valeurs expérimentales pour les fractions volumiques inférieures à 20%, mais distants pour la fraction volumique de 30%. L'écart entre les propriétés thermomécaniques calculées et les résultats expérimentaux démontre que les hypothèses de modélisation sont trop restrictives. Cette étude n'est cependant pas sans intérêt. En effet, ce modèle simple permet d'identifier plusieurs paramètres qui ont potentiellement une grande influence sur les propriétés thermomécaniques du matériau. Ce potentiel d'identification est très important dans le processus de prototypage des nouveaux matériaux.

La méthode de génération automatique des microstructures de matériaux hétérogènes rend accessible ce type d'étude en simplifiant et en automatisant la génération des microstructures et leur analyse. À partir de ces constatations, un modèle plus détaillé peut être élaboré pour prendre en compte certaines propriétés des constituants ou caractéristiques du procédé de mise en œuvre du composite. Par exemple, un comportement thermomécanique isotrope transverse pourrait être appliqué aux particules de chanvre. Il serait aussi intéressant d'évaluer l'effet de l'élancement des particules cylindriques sur le comportement thermomécanique.

Chapitre 7

Conclusions et perspectives

7.1 Conclusions

La caractérisation numérique du comportement thermomécanique d'un matériau hétérogène à partir des propriétés intrinsèques de ses constituants nécessite l'enchaînement d'opérations qui sont complexes et diversifiées. L'objectif de ce travail est de proposer une nouvelle approche automatisée de modélisation numérique des microstructures. Cette approche vise à outrepasser les trois principales limitations des approches existantes qui sont l'absence d'utilisation de méthodes de modélisation géométrique du solide, l'absence d'outils de maillage robustes et éprouvés et parfois le manque d'automatisation de la génération, de la simulation et de l'analyse des volumes élémentaires statistiques.

La méthode proposée repose sur une approche intégrée CAO-MEF qui allie les outils de la modélisation géométrique, les outils de la génération automatique de maillage et la méthode des éléments finis. C'est cette approche intégrée dans le contexte de l'homogénéisation numérique des matériaux hétérogènes qui rend ce projet novateur. Cet accomplissement est rendu possible grâce au rassemblement de domaines de recherches qui sont habituellement traités de façon indépendante. En effet, la plupart des approches de modélisation numérique des microstructures utilisent des outils distincts pour modéliser la géométrie de la microstructure, générer le maillage et effectuer les simulations EF. Le passage d'un outil à l'autre est complexe et nécessite l'intervention de l'utilisateur. L'approche intégrée CAO-MEF, présentée sous la forme du Modèle de Topologie Unifié est développée dans le but de simplifier ces transitions et d'améliorer la qualité des modèles en favorisant l'interaction des différents outils. Ce modèle est au cœur de l'approche automatisée de modélisation numérique des microstructures.

La modélisation géométrique, par l'utilisation des outils CAO, permet de générer une représentation détaillée de la microstructure du matériau. Les différents constituants peuvent être représentés avec des formes complexes et ces formes sont correctement positionnées dans le VES grâce aux outils CAO. La génération automatique de maillage de modèle géométrique offre des outils de discrétisation qui sont fiables et adaptés aux formes géométriques complexes. La prise en compte des contraintes de maillage lors de la génération de la géométrie améliore grandement la convergence du mailleur, sans laquelle l'étude ne peut être réalisée. L'interaction des outils CAO et de maillage offre la possibilité de définir précisément la taille des éléments de maillage du VES à l'aide d'une carte de taille qui est en fonction de plusieurs paramètres géométriques. Cette carte fait en sorte de minimiser la taille du maillage tout en assurant une discrétisation de qualité tant au point de vue de la forme des éléments qu'au point de vue de la description locale des champs locaux. Les nœuds milieux des éléments quadratiques en contact avec une courbe ou surface non-planaire sont repoussés sur la géométrie pour éliminer l'effet de pavage qui affecte significativement la représentation de la microstructure. Les études EF, en élasticité linéaire et en conduction thermique, sont générées automatiquement selon les propriétés des matériaux et les conditions aux limites appliquées sur les entités topologiques grâce au lien entre les entités topologiques du modèle géométrique et les éléments de maillage. Les résultats EF sont automatiquement importés dans le MTU et analysés. L'enchaînement automatique de toutes ces étapes est rendu possible grâce l'interaction des différents outils et ne nécessite aucune intervention de l'utilisateur.

Un second aspect novateur de ce travail est l'utilisation d'une méthode d'érosion des VES afin de ne considérer que les résultats au cœur du VES [17]. Cette méthode permet d'éviter les effets de bord liés aux conditions aux limites et ainsi obtenir une estimation du comportement thermomécanique plus fiable. Cette méthode rend possible l'utilisation de la dynamique des corps rigides pour positionner aléatoirement des fractions volumiques élevées de particules de forme quelconque. L'effet de l'absence de particules au bord du VES à cause des contraintes liées au maillage est ainsi atténué à mesure que la distance d'érosion augmente.

L'approche numérique proposée dans ce travail est employée pour simuler le comportement thermomécanique d'un composite constitué de particules de chanvre et d'une matrice cimentaire. Malgré l'écart entre les valeurs calculées des conductivités thermiques, des modules d'élasticité et les valeurs expérimentales, la méthode demeure pertinente puisqu'elle permet d'identifier rapidement si les hypothèses de bases du modèle numérique sont adéquates. Basé sur cette analyse, le modèle peut être modifié afin de prendre en compte des nouveaux paramètres.

7.2 Perspectives

7.2.1 Modélisation géométrique des microstructures

Les outils de modélisation géométrique des microstructures développés dans le cadre de ce travail permettent de générer toute sorte de formes de particules. Par exemple, il serait possible de générer des matériaux constitués de particules enrobées (Fig. 7.1). L'enrobage de ces particules pourrait être maillé avec des pentaèdres ce qui permettait de minimiser le nombre d'éléments puisqu'un seul élément est nécessaire pour combler l'épaisseur. Ce type de particules est notamment utilisé dans les réacteurs nucléaires sous la forme de particules de combustible [83]. Les outils de modélisation géométrique peuvent être utilisés pour générer des modèles géométriques de polycristaux [84–87]. La figure 7.2a illustre le modèle géométrique d'un VES contenant 100 grains et la figure 7.2b son maillage. La méthode de génération du modèle géométrique d'un polycristaux fut mise en œuvre pas l'étudiant Pierre Nadeau [88] dans le cadre de son projet de fin d'étude au baccalauréat en génie mécanique à l'UQTR. Cette méthode utilise plusieurs méthodes développées dans le cadre de projet.

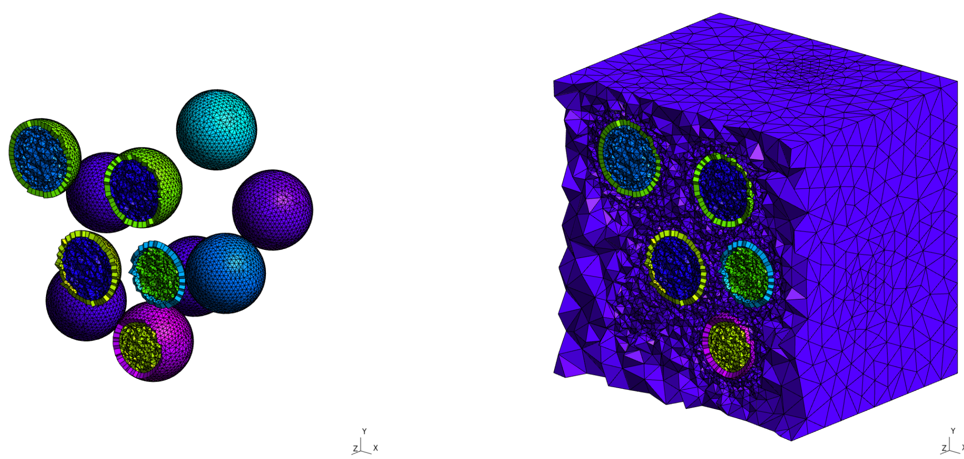
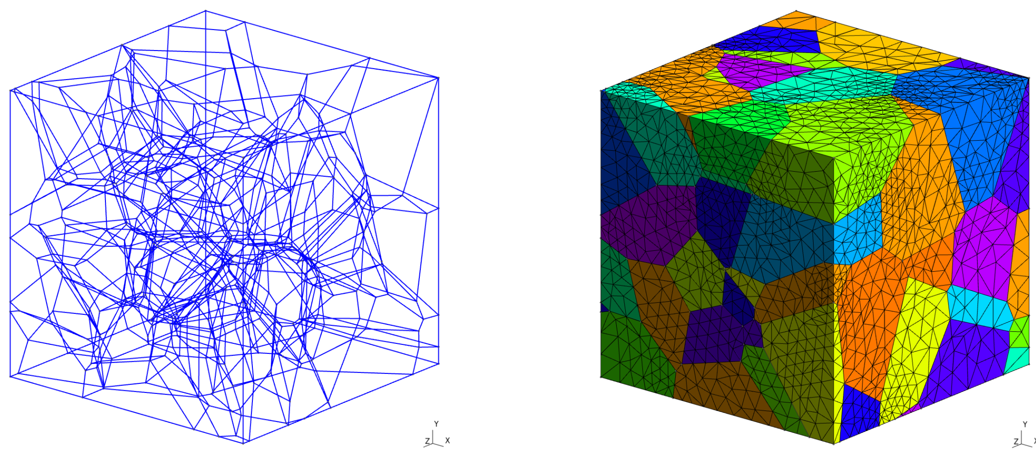


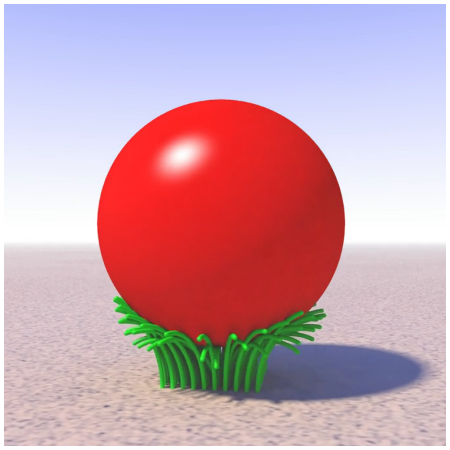
Figure 7.1 – Particules enrobées



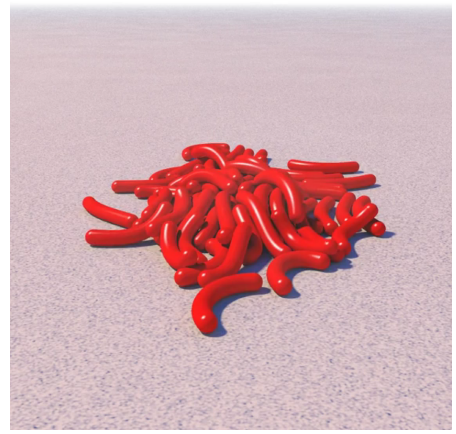
(a) (b)

Figure 7.2 – Modèle BREP et maillage d'un polycristaux de 100 grains. a) Modèle BREP. b) Maillage

Dans ce travail, deux méthodes de génération de microstructures sont présentées soit la méthode «Random Sequential Adsorption» soit une approche basée sur la dynamique des corps rigides. La méthode RSA est simple à mettre en œuvre, mais est limitée quant aux fractions volumiques maximales qu'elle peut atteindre. La méthode DCR permet d'atteindre des fractions volumiques plus importantes que la méthode RSA, car elle permet aux particules de s'entasser. La méthode DCR, dans son état actuel, ne peut cependant atteindre certaines fractions volumiques observables expérimentalement, car les particules simulées sont rigides. En effet, des particules déformables peuvent plus facilement occuper l'espace que des particules rigides. Une solution intéressante serait d'employer des particules déformables dont le comportement est défini par des éléments finis par la formulation des coordonnées nodales absolues [89]. La figure 7.3 illustre deux exemples de solides déformables utilisés dans des simulations de dynamique des corps déformables.



(a)



(b)

FIGURE 7.3 – Exemple de simulation de la dynamique des corps déformables. a) Éléments de poutres supportant une sphère rigide [90]. b) Enchevêtrement d'éléments de poutre [91]

7.2.2 Carte de taille et procédure de remaillage

L'élaboration d'une carte de taille en fonction des estimateurs d'erreur [92,93] pourrait contribuer à réduire l'imprécision des estimations du comportement du matériau. Suite à une première étude EF, une carte de taille serait créée à partir des estimateurs d'erreur. Le modèle serait ensuite remaillé selon cette nouvelle carte. Cette approche pourrait être employée pour chaque VES ou pourrait être utilisée pour étalonner les paramètres de la carte actuelle.

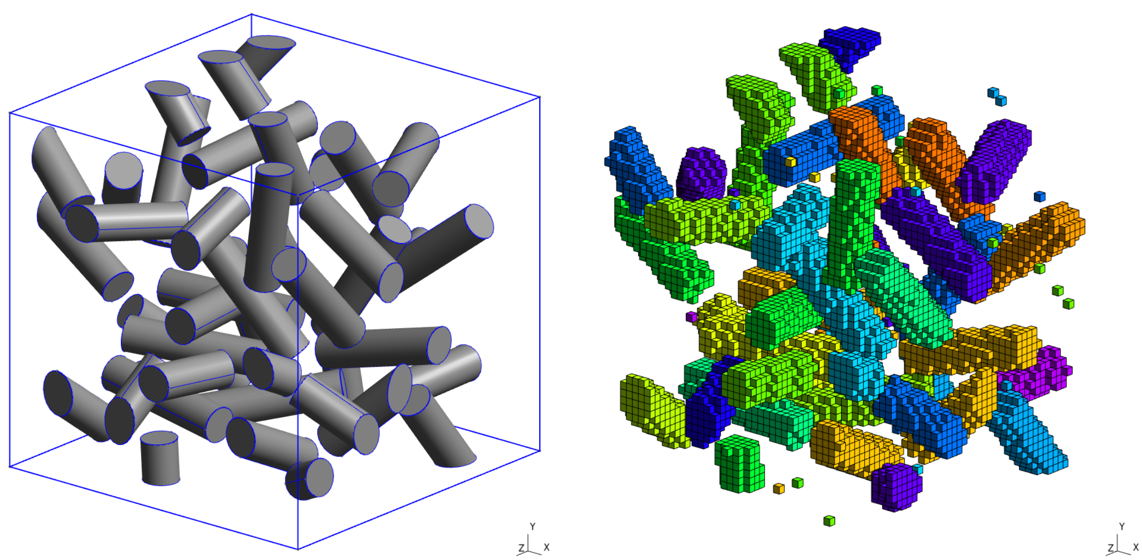
La modélisation du comportement non linéaire des matériaux viscoélastiques et/ou viscoplastiques pourrait aussi bénéficier d'une procédure de remaillage en fonction de la qualité des éléments déformés. En effet, une des problématiques des simulations en hypothèses de grandes déformations est la dégradation de la qualité des éléments lorsque les déformations deviennent importantes. Ces notamment le cas lors des simulations d'élastomères chargés [94]. Une procédure de remaillage pourrait améliorer convergence des calculs en grands déplacements.

7.2.3 Constituants aux propriétés thermomécaniques orthotropes

Les propriétés mécaniques et thermiques utilisées dans ce travail sont isotropes. La méthode de modélisation des matériaux hétérogènes proposée peut être utilisée pour simuler des matériaux dont les constituants ont des propriétés thermomécaniques orthotropes. Il serait intéressant, notamment pour l'étude du composite chaux-chanvre, d'appliquer des propriétés anisotropes transverses selon l'orientation des particules. Aussi, l'orientation des particules est générée aléatoirement selon une distribution isotrope. La méthode proposée permet de générer des orientations privilégiées. Il pourrait être pertinent de vérifier si l'orientation des particules affecte significativement le comportement du matériau.

7.2.4 Résolution par la méthode FFT

La méthode de résolution par les transformées de Fourier rapides suscite beaucoup d'intérêts compte tenu de la vitesse à laquelle il est possible de résoudre un problème thermomécanique des milieux continusavec des conditions aux limites périodiques [95]. Les outils développés dans ce travail pourraient être utilisés pour générer la géométrie de la microstructure et transposer cette représentation sur la grille régulière de la méthode FFT (Fig 7.4). Le solveur FFT pourrait être intégré comme le solveur EF pour ainsi automatiser l'analyse et le traitement des résultats.



(a) (b)

Figure 7.4 – Maillage hexaédrique de la microstructure C1FV10. a) Modèle BREP. b) Maillage hexaédrique

Bibliographie

[1] M. Bornert, T. Bretheau, and P. Gilormini. *Homogénéisation en mécanique des matériaux, Tome 1 : Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques.* Hermes science, 2001.

[2] C. Huet. Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 38(6) :813 – 841, 1990.

[3] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, and D. Jeulin. Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 40(13) :3647 – 3679, 2003.

[4] W. Voigt. Ueber die beziehung zwischen den beiden elasticitätsconstanten isotroper körper. *Annalen der Physik*, 274(12) :573–587, 1889.

[5] A. Reuss. Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle . *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 9(1) :49–58, 1929.

[6] O Wiener. Die theorie des mischkorpers fur das feld der statonaren stromung. i. die mittelwertsatze fur kraft, polarisation and energie, der abhandlungen der mathematisch-physischen klasse der konigl. *Sachsischen Gesellschaft der Wissenschaften*, 32 :509–604, 1912.

[7] Z. Hashin and S. Shtrikman. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11(2) :127 – 140, 1963.

[8] J. D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 241(1226) :376–396, 1957.

[9] B. Widom. Random sequential addition of hard spheres to a volume. *The Journal of Chemical Physics*, 44(10) :3888–3894, 1965.

[10] J. Feder. Random sequential adsorption. *Journal of Theoretical Biology*, 87(2) :237–254, 1980.

[11] Andrei A. Gusev. Representative volume element size for elastic composites : A numerical study. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 45(9) :1449 – 1459, 1997.

[12] J.C. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet. Effective properties of composite materials with periodic microstructure : a computational approach. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 172(1) :109 – 143, 1999.

[13] H.J Böhm, A Eckschlager, and W Han. Multi-inclusion unit cell models for metal matrix composites with randomly oriented discontinuous reinforcements. *Computational Materials Science*, 25(1-2) :42–53, sep 2002.

[14] J. Segurado and J. Llorca. A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(10) :2107 – 2121, 2002.

[15] Sreedhar Kari, Harald Berger, Reinaldo Rodriguez-Ramos, and Ulrich Gabbert. Computational evaluation of effective material properties of composites reinforced by randomly distributed spherical particles. *Composite Structures*, 77(2) :223 – 231, 2007.

[16] L. Brassart, I. Doghri, and L. Delannay. Homogenization of elasto-plastic composites coupled with a nonlinear finite element analysis of the equivalent inclusion problem. *International Journal of Solids and Structures*, 47(5) :716 – 729, 2010.

[17] François Di Paola. *Multi-scale modeling of the thermo-mechanical behavior of particle-based composites*. Thèse, Ecole Centrale Paris, November 2010.

[18] Azra Rasool and Helmut J. Böhm. Effects of particle shape on the macroscopic and microscopic linear behaviors of particle reinforced composites. *International Journal of Engineering Science*, 58 :21–34, sep 2012. Recent advances in Micromechanics.

[19] Shan-Tung Tu, Wen-Zhong Cai, Yong Yin, and Xiang Ling. Numerical simulation of saturation behavior of physical properties in composites with randomly distributed second-phase. *Journal of Composite Materials*, 39(7) :617–631, 2005.

[20] A. Lin and S.-P. Han. On the distance between two ellipsoids. *SIAM Journal on Optimization*, 13(1) :298–308, 2003.

[21] O. Pierard, C. Gonzàlez, J. Segurado, J. LLorca, and I. Doghri. Micromechanics of elasto-plastic materials reinforced with ellipsoidal inclusions. *International Journal of Solids and Structures*, 44(21) :6945 – 6962, 2007.

[22] Konrad Schneider, Benjamin Klusemann, and Swantje Bargmann. Automatic three-dimensional geometry and mesh generation of periodic representative volume elements for matrix-inclusion composites. *Advances in Engineering Software*, 99 :177 – 188, 2016.

[23] S. Kari, H. Berger, and U. Gabbert. Numerical evaluation of effective material properties of randomly distributed short cylindrical fibre composites. *Computational*

Materials Science, 39(1) :198 – 204, 2007. Proceedings of the 15th International Workshop on Computational Mechanics of Materials.

[24] Wook Jin Lee, Jae Hyoung Son, Ik Min Park, Jeong-Jung Oak, Hisamichi Kimura, and Yong Ho Park. Analysis of 3d random al18b4o33 whisker reinforced mg composite using FEM and random sequential adsorption. *MATERIALS TRANSACTIONS*, 51(6) :1089–1093, 2010.

[25] Wenlong Tian, Lehua Qi, Jiming Zhou, Junhao Liang, and Yuqin Ma. Representative volume element for composites reinforced by spatially randomly distributed discontinuous fibers and its applications. *Composite Structures*, 131 :366 – 373, 2015.

[26] Xiaofeng Wang, Mingzhong Zhang, and Andrey P. Jivkov. Computational technology for analysis of 3d meso-structure effects on damage and failure of concrete. *International Journal of Solids and Structures*, 80 :310 – 333, 2016.

[27] T. Hales, M. Adams, G. Bauer, T.D. Dang, J. Harrison, L.T. Hoang, C. Kaliszyk, V. Magron, S. McLaughlin, T.T. Nguyen, Q.T. Nguyen, T. Nipkow, S. Obua, J. Pleso, J. Rute, A. Solovyev, T.H.A. Ta, N.T. Tran, T.D. Trieu, J. Urban, K. Vu, and R. Zumkeller. A formal proof of the kepler conjecture. *Forum of Mathematics, Pi*, 5, 2017.

[28] D.W. Cooper. Random-sequential-packing simulations in three dimensions for spheres. *Physical Review A*, 38(1) :522–524, 1988.

[29] J D Sherwood. Packing of spheroids in three-dimensional space by random sequential addition. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 30(24) :L839, 1997.

[30] B.D. Lubachevsky. How to simulate billiards and similar systems. *Journal of Computational Physics*, 94(2) :255–283, 1991.

[31] Boris D. Lubachevsky, Frank H. Stillinger, and Elliot N. Pinson. Disks vs. spheres : Contrasting properties of random packings. *Journal of Statistical Physics*, 64(3) :501–524, Aug 1991.

[32] Aleksandar Donev, Salvatore Torquato, and Frank H. Stillinger. Neighbor list collision-driven molecular dynamics simulation for nonspherical hard particles. i. algorithmic details. *Journal of Computational Physics*, 202(2) :737 – 764, 2005.

[33] Aleksandar Donev, Salvatore Torquato, and Frank H. Stillinger. Neighbor list collision-driven molecular dynamics simulation for nonspherical hard particles. : Ii. applications to ellipses and ellipsoids. *Journal of Computational Physics*, 202(2) :765 – 793, 2005.

[34] Tanh-Hùng PHAM, Julien Férec, Vincent Picandet, and Philppe PILVIN. Etude expérimentale, théorique et numérique de l'élasticité de composites chaux-chanvre. In *21 ème Congrès Français de Mécanique*, 01 2013.

[35] Brian Vincent Mirtich. *Impulse-based Dynamic Simulation of Rigid Body Systems*. PhD thesis, 1996.

[36] J.E Lloyd. Fast implementation of lemke's algorithm for rigid body contact simulation. In *Proceedings of the 2005 IEEE International Conference on Robotics and Automation*, volume 2005, pages 4538–4543. IEEE, 2005.

[37] Vincent Acary and Bernard Brogliato. *Numerical Methods for Nonsmooth Dynamical Systems : Applications in Mechanics and Electronics*, volume 35 of *Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2008.

[38] David Stewart and J Trinkle. Implicit time-stepping scheme for rigid body dynamics with coulomb friction. volume 1, pages 162–169, 2000.

[39] Project Chrono. Chrono : An Open Source Framework for the Physics-Based Simulation of Dynamic Systems. `http://projectchrono.org`.

[40] Yi Pan, Lucian Iorga, and Assimina A. Pelegri. Analysis of 3d random chopped fiber reinforced composites using fem and random sequential adsorption. *Computational Materials Science*, 43(3) :450 – 461, 2008.

[41] A. El Moumen, T. Kanit, A. Imad, and H. El Minor. Effect of reinforcement shape on physical properties and representative volume element of particles-reinforced composites : Statistical and numerical approaches. *Mechanics of Materials*, 83 :1 – 16, 2015.

[42] François Willot. Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields. *Comptes Rendus Mécanique*, 343(3) :232 – 245, 2015.

[43] Lionel Gélébart and Julien Derouillat. AMITEX_FFTP - Simulations FFT massivement parallèles en mécanique des matériaux hétérogènes. In *13e colloque national en calcul des structures*, Giens, Var, France, May 2017. Université Paris-Saclay.

[44] H. Moulinec and P. Suquet. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 157(1) :69 – 94, 1998.

[45] G. Dhatt and G. Touzot. *Présentation de la Methode des Elements Finis*. Collection Université de Compiègne. Maloine, 1981.

[46] Jean-Louis Batoz and G Dhatt. *Modélisation des structures par éléments finis*. Presses de l'Université Laval, Sainte-Foy, Éd. canadienne. edition, 1990.

[47] Ian Anthony Stroud and Hildegarde Nagy. *How Objects Are Modelled*, pages 65–106. Springer London, London, 2011.

[48] Michael E. Mortenson. *Geometric Modeling*. Industrial Press, Inc., New York, NY, USA, 2006.

[49] Fumihiko Kimura. *Geometric modelling : theoretical and computational basis towards advanced CAD applications : IFIP TC5/WG5.2 Sixth International Workshop on Geometric Modelling, December 7-9, 1998, Tokto, Japan*. The International Federation for Information Processing (Collection) 75. Kluwer Academic, Boston, 2001.

[50] SolidWorks. `https://www.solidworks.com`, 2019.

[51] Solid Edge. `https://solidedge.siemens.com`, 2019.

[52] V. Francois and J.C. Cuilliere. Automatic mesh pre-optimization based on the geometric discretization error. *Advances in Engineering Software*, 31(10) :763 – 774, 2000.

[53] Jean-Christophe Cuillière, Vincent François, and Rémi Lacroix. A new approach to automatic and a priori mesh adaptation around circular holes for finite element analysis. *Computer-Aided Design*, 77 :18 – 45, 2016.

[54] Jean-Christophe Cuillière and Vincent Francois. Towards quantitative mesh pre-optimization for finite element analysis. *Computer-Aided Design and Applications*, 14(4) :392–407, nov 2016.

[55] Thomas Grätsch and Klaus-Jürgen Bathe. A posteriori error estimation techniques in practical finite element analysis. *Computers & Structures*, 83(4-5) :235 – 265, jan 2005.

[56] Pascal J. Frey and Loic Marechal. Fast adaptive quadtree mesh generation. *Proceedings of the 7th International Meshing Roundtable*, 05 2000.

[57] Pascal Jean Frey and Paul-Louis George. *Mesh Generation : Application to Finite Elements*. ISTE, 2007.

[58] F. Hermeline. Triangulation automatique d'un polyèdre en dimension n. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis - Modélisation Mathématique et Analyse Numérique*, 16(3) :211–242, 1982.

[59] Peter Fleischmann and Siegfried Selberherr. Three-dimensional delaunay mesh generation using a modified advancing front approach. 12 1999.

[60] Alain Rassineux. *Maillage automatique tridimensionnel par une méthode frontale pour la méthode des éléments finis*. PhD thesis, 1995. Thèse de doctorat dirigée par Gueury, Michel Mécanique Énergétique Nancy 1 1995.

[61] Yasushi Ito, Alan M. Shih, and Bharat K. Soni. Reliable isotropic tetrahedral mesh generation based on an advancing front method. In *IMR*, 2004.

[62] G. Foucault, J.-C. Cuillière, V. François, J.-C. Léon, and R. Maranzana. Generalizing the advancing front method to composite surfaces in the context of meshing constraints topology. *Computer-Aided Design*, 45(11) :1408 – 1425, nov 2013.

[63] JC Cuillière. An adaptive method for the automatic triangulation of 3d parametric surfaces. *Computer-Aided Design*, 30(2) :139 – 149, feb 1998.

[64] V. François and J-C. Cuillière. *An a Priori Adaptive 3D Advancing Front Mesh Generator Integrated to Solid Modeling*. Springer Netherlands, 01 2003.

[65] Vincent François. *Méthodes de maillage et de remaillage automatiques appliquées à la modification de modèle dans le contexte de l'ingenierie simultanée*. PhD thesis, 01 1998.

[66] Jean-Christophe Cuillière and Vincent Francois. Integration of cad, fea and topology optimization through a unified topological model. *Computer-Aided Design and Applications*, 11(5) :493–508, 2014.

[67] J.C. Cuillière and R. Maranzana. Automatic and a priori refinement of three-dimensional meshes based on feature recognition techniques. *Advances in Engineering Software*, 30(8) :563 – 573, 1999.

[68] Jean-Christophe Cuillière, Vincent François, Khaled Souaissa, Abdelmajid Benamara, and Hedi BelHadjSalah. Automatic comparison and remeshing applied to cad model modification. *Computer-Aided Design*, 43(12) :1545 – 1560, 2011.

[69] Open Cascade S.A.S. Open cascade technology. www.opencascade.com, 2018.

[70] Christophe Geuzaine and Jean-François Remacle. Gmsh : A 3-d finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79(11) :1309–1331.

[71] A. Tasora, R. Serban, H. Mazhar, A. Pazouki, D. Melanz, J. Fleischmann, M. Taylor, H. Sugiyama, and D. Negrut. Chrono : An open source multi-physics dynamics engine. In T. Kozubek, editor, *High Performance Computing in Science and Engineering – Lecture Notes in Computer Science*, pages 19–49. Springer, 2016.

[72] Suresh G. Advani and Charles L. Tucker. The use of tensors to describe and predict fiber orientation in short fiber composites. *Journal of Rheology*, 31(8) :751–784, 1987.

[73] Paul-Louis George and Houman Borouchaki. Construction de maillages de degré 2- Partie 3 : Tétraèdre P2. Research Report RR-7626, INRIA, May 2011.

[74] Michael Turner, Joaquim Peiró, and David Moxey. Curvilinear mesh generation using a variational framework. *Computer-Aided Design*, 103 :73 – 91, 2018. 25th International Meshing Roundtable Special Issue : Advances in Mesh Generation.

[75] A. Johnen, C. Geuzaine, T. Toulorge, and J.-F. Remacle. Efficient computation of the minimum of shape quality measures on curvilinear finite elements. *Computer-Aided Design*, 103 :24 – 33, 2018. 25th International Meshing Roundtable Special Issue : Advances in Mesh Generation.

[76] Thomas Toulorge, Christophe Geuzaine, Jean-François Remacle, and Jonathan Lambrechts. Robust untangling of curvilinear meshes. *Journal of Computational Physics*, 254 :8 – 26, 2013.

[77] Électricité de France. Solveur éléments finis Code_Aster. `www.code-aster.org`, 2019.

[78] Tanh Hùng Pham. *Modélisation multi-échelles des propriétés thermiques et élastiques de composites chaux-chanvre*. Thèse, 2014.

[79] Tai Thu Nguyen. *Contribution à l'étude de la formulation et du procédé de fabrication d'éléments de construction en béton de chanvre*. Thèse, Université de Bretagne Sud, 2010.

[80] Francesco DE PONTE and Sorïn KLARSFELD. Conductivité thermique des isolants. *Techniques de l'ingénieur Mesure des grandeurs thermophysiques*, base documentaire : TIB544DUO.(ref. article : r2930), 2002.

[81] P Carré and R Le Gall. Définition et détermination des conductivités thermiques dans les structures multicouches cvr–balsa. *Revue générale de thermique*, 340, 1990.

[82] T.T. Nguyen, V. Picandet, Philippe Carré, T. LeCompte, Sofiane AMZIANE, and C. Baley. Effect of compaction on mechanical and thermal properties of hemp concrete . *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, Volume 14(Issue 5) :545–560, 2010.

[83] Lance L. Snead, Takashi Nozawa, Yutai Katoh, Thak-Sang Byun, Sosuke Kondo, and David A. Petti. Handbook of sic properties for fuel performance modeling. *Journal of Nuclear Materials*, 371(1) :329 – 377, 2007. Nuclear Fuels and Structural Materials 1.

[84] R. Quey, P.R. Dawson, and F. Barbe. Large-scale 3d random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(17) :1729 – 1745, 2011.

[85] Clotilde Berdin, Zhao Yue Yao, and Serge Pascal. Internal stresses in polycrystalline zirconia : Microstructure effects. *Computational Materials Science*, 70 :140 – 144, 2013.

[86] E. Héripré, M. Dexet, J. Crépin, L. Gélébart, A. Roos, M. Bornert, and D. Caldemaison. Coupling between experimental measurements and polycrystal finite element calculations for micromechanical study of metallic materials. *International Journal of Plasticity*, 23(9) :1512 – 1539, 2007.

[87] Swantje Bargmann, Benjamin Klusemann, Jürgen Markmann, Jan Eike Schnabel, Konrad Schneider, Celal Soyarslan, and Jana Wilmers. Generation of 3d representative volume elements for heterogeneous materials : A review. *Progress in Materials Science*, 96 :322 – 384, 2018.

[88] P. Nadeau J.C. Cuillière Ph. Pilvin V. François, A. Couture. Outils cao pour le calcul de l'homogénéisation des matériaux composites et des polycristaux. In *14e colloque national en calcul des structures*, Giens, Var, France, May 2018.

[89] Oleg Dmitrochenko. Finite elements using absolute nodal coordinates for large-deformation flexible multibody dynamics. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 215(2) :368 – 377, 2008. Proceedings of the Third International Conference on Advanced Computational Methods in Engineering (ACOMEN 2005).

[90] Dan Melanz. A rigid sphere is dropped on a 10x10 array of ancf beam elements that are fixed at one end. `https://vimeo.com/58188590`.

[91] Dan Melanz. Several ancf beam elements are dropped on the ground. `https://vimeo.com/58189498`.

[92] J. Z. Zhu and O. C. Zienkiewicz. Adaptive techniques in the finite element method. *Communications in Applied Numerical Methods*, 4(2) :197–204.

[93] R. Verfürth. A posteriori error estimation and adaptive mesh-refinement techniques. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 50(1) :67 – 83, 1994.

[94] T. Parenteau, E. Bertevas, G. Ausias, R. Stocek, Y. Grohens, and P. Pilvin. Characterisation and micromechanical modelling of the elasto-viscoplastic behavior of thermoplastic elastomers. *Mechanics of Materials*, 71 :114 – 125, 2014.

[95] Lionel Gélébart and Romain Mondon-Cancel. Non-linear extension of fft-based methods accelerated by conjugate gradients to evaluate the mechanical behavior of composite materials. *Computational Materials Science*, 77 :430 – 439, 2013.

Annexe A

Mise en application de la démarche d'automatisation

La simulation d'un nouveau matériau hétérogène est déclinée en trois étapes qui sont la génération automatique d'une arborescence de fichiers de paramètres et scripts (Section A.1), la génération automatique des VES (Section A.2) et le post-traitement automatique des résultats (Section A.3).

A.1 Génération automatique des fichiers de paramètres et scripts

La première étape de l'étude numérique d'un nouveau matériau hétérogène consiste à créer une arborescence de fichiers de paramètres et des fichiers de scripts qui contrôleront automatiquement la simulation. L'utilisateur doit choisir une valeur pour chacun des paramètres de la table A.1. À partir de ces choix, l'arborescence de fichiers de paramètres est créée.

Table A.1 – Choix des paramètres principaux pour la création de l'arborescence de fichiers de paramètres et scripts

Type de générateur	RSA, DCR
Type d'inclusion	Sphère, Cylindre, ...
Type d'élément de maillage	Tétraèdre linéaire, Tétraèdre quadratique
Type d'étude	Mécanique, Thermique

A.1.1 Description de l'arborescence de fichiers de paramètres

L'arborescence a comme point de départ le dossier \paramètre qui contiens d'autres sous dossiers de paramètres spécifiques aux différentes étapes de la construction du modèle numérique. La déclinaison de l'arborescence de fichiers de paramètres est présentée à la figure A.1.

FIGURE A.1 – Arborescence des fichiers de paramètres

- \paramètre
  - \géométrie
    - param_geo_particule.txt
  - \carte
    - param_carte.txt
  - \maillage
    - param_maillage.txt
  - \matériau
    - param_materiau_particule.txt
    - param_materiau_matrice.txt
  - \étude
    - param_etude_CLDH_sph.txt
    - param_etude_CLCH_sph.txt
    - param_etude_CLDH_dev.txt
    - param_etude_CLCH_dev.txt
  - \post_traitement
    - param_post_CAO.txt
    - param_post_maillage.txt
    - param_post_champ_epsilon.txt
    - param_post_champ_sigma.txt

Chacun des fichiers de l'arborescence possède une liste de paramètres qui sont initialisés avec des valeurs par défaut. L'utilisateur peut ainsi visualiser chacun des paramètres disponibles pour la configuration initiale choisie et les modifier selon les besoins. La figure A.2 liste les paramètres disponibles dans le fichier de configuration de la géométrie pour des particules cylindriques disposées selon la dynamique des corps rigides.

FIGURE A.2 – Fichier de paramètres de configuration de la géométrie pour des particules cylindriques disposées selon la dynamique des corps rigides.

```
Type_generateur = 1  //Type de generateur : RSA [0], DCR [1]
Nom_groupe_inclusion = Particule  //Nom du groupe d'inclusion (Ex: Particule)
Boite3D_distribution_Xmin = -0.25  //Xmin boite3D de distribution d'inclusion
Boite3D_distribution_Ymin = -0.25  //Ymin boite3D de distribution d'inclusion
Boite3D_distribution_Zmin = -0.25  //Zmin boite3D de distribution d'inclusion
Boite3D_distribution_Xmax = 1.25  //Xmax boite3D de distribution d'inclusion
Boite3D_distribution_Ymax = 1.25  //Ymax boite3D de distribution d'inclusion
Boite3D_distribution_Zmax = 1.25  //Zmax boite3D de distribution d'inclusion
Nb_pas_X = 20  //Nombre de pas selon X pour la creation d'un octree
Nb_pas_Y = 20  //Nombre de pas selon Y pour la creation d'un octree
Nb_pas_Z = 20  //Nombre de pas selon Z pour la creation d'un octree
Fraction_volumique_cible = 0.1  //Fraction volumique cible d'inclusion [0.0, 1.0]
Eps_fraction_volumique = 0.001  //Epsilon fraction volumique
Avec_intersections = 1  //Avec ou sans intersections avec le bord du VES : Sans [0] Avec [1]
Avec_interface_graphique = 0  //Avec l'interface graphique : Sans [0] Avec [1]
Facteur_reduction_vitesse = 0.75  //Facteur de reduction de la vitesse des particules
Eps_vitesse = 0.0001  //Eps vitesse
Friction = 0.0  //Friction entre les particules
Pas_temps_sim = 0.01  //Pas de temps pour la simulation
Temps_max_sim = 60.0  //Temps maximal de la simulation
Type_inclusion = 1  //Type d'inclusion : Sphere [0], Cylindre [1]
Mu_rayon = 0.05  //Moyenne du rayon du cylindre
Sigma_rayon = 0.0  //Ecart type du rayon du cylindre
Type_distribution_rayon = 0  //Type de distribution du rayon : Fixe[0], Uniforme[1], Normale[2]
Mu_longueur = 0.4  //Moyenne de la longueur du cylindre
Sigma_longueur = 0.0  //Ecart type de la longueur du cylindre
Type_distribution_longueur = 0  //Type de distribution de la longueur : Fixe[0], Uniforme[1], Normale[2]
Mu_theta = 0.0  //Moyenne de l'angle theta
Sigma_theta = 1.0  //Ecart type de l'angle theta
Type_distribution_theta = 1  //Type de distribution de l'angle theta : Fixe[0], Uniforme[1], Normale[2]
Mu_phi = 0.0  //Moyenne de l'angle phi
Sigma_phi = 1.0  //Ecart type de l'angle phi
Type_distribution_phi = 1  //Type de distribution de l'angle phi : Fixe[0], Uniforme[1], Normale[2]
Porosite = 0  //Considerer l'inclusion comme etant une porosite (vide) [1]
Distance_min_inter_volume = 0.04  //Distance minimale qui separe deux inclusions
Volume_min = 0.0008  //Volume minimal admissible de l'inclusion
Aire_min = 0.001963  //Aire minimal admissible d'une face de l'inclusion
Longueur_min = 0.02  //Longueur minimal admissible d'une arete
Angle_min = 0.7854  //Angle minimal admissible entre deux faces
```

A.1.2 Liste des scripts

Suite au choix des paramètres principaux de la simulation, quatre fichiers de scripts sont créés : ***ves***, ***generer_nb_ves***, ***post_traitement*** et ***figures.gnu***. Les scripts sont spécifiques au choix des paramètres principaux.

A.2 Génération automatique des VES

Le script ***ves*** contient toutes les commandes nécessaires à la génération, au maillage et à la simulation d'un VES. La figure A.3 illustre l'enchaînement de ces commandes. Ce script sert de script de base à la simulation d'un VES. Ce script peut être modifié afin de complexifier la simulation.

FIGURE A.3 – Fichier de script ***ves*** simplifié

```
#Geometrie
executer microstructure.exe -gen_geo [...] param_geo_particule.txt
#Materiau
executer microstructure.exe -gen_mat [...] lst_param_materiaut.txt
#Carte
executer microstructure.exe -gen_carte [...] param_carte.txt
#Maillage
executer microstructure.exe -gen_mg_maill [...] param_maillage.txt
#Etude
executer microstructure.exe -gen_etude [...] param_etude_CLDH_sph.txt
executer microstructure.exe -gen_etude [...] param_etude_CLCH_sph.txt
executer microstructure.exe -gen_etude [...] param_etude_CLDH_dev.txt
executer microstructure.exe -gen_etude [...] param_etude_CLCH_dev.txt
#Calcul
executer microstructure.exe -gen_calcul [...] param_etude_CLDH_sph.txt
executer microstructure.exe -gen_calcul [...] param_etude_CLCH_sph.txt
executer microstructure.exe -gen_calcul [...] param_etude_CLDH_dev.txt
executer microstructure.exe -gen_calcul [...] param_etude_CLCH_dev.txt
```

Le script ***generer_nb_ves*** permet d'enchaîner automatiquement la simulation d'un certain nombre de VES en appelant le script ***ves***. Par exemple, la commande ***generer_nb_ves 1 50*** lancera la simulation de 50 VES l'un à la suite de l'autre. Si l'utilisateur souhaite en refaire 20 autres, il suffit de lancer la commande ***generer_nb_ves 51 70***.

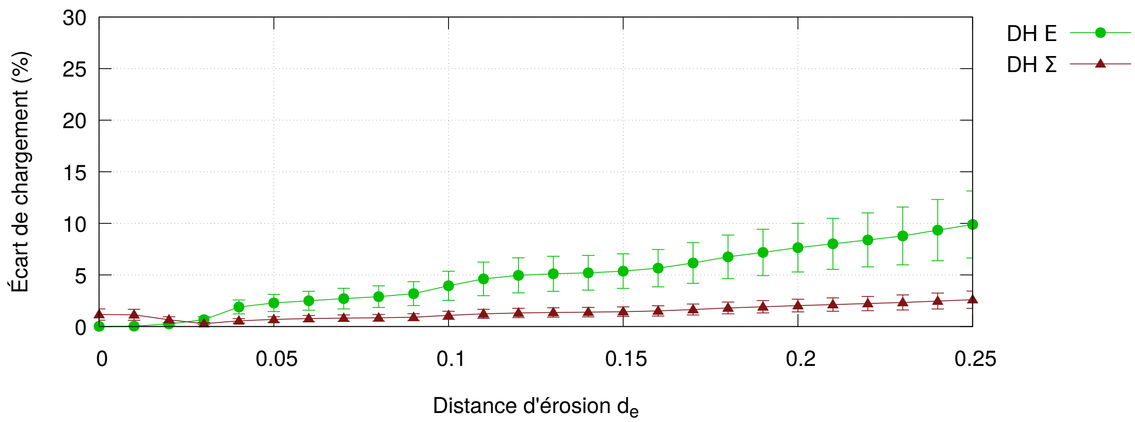
A.3 Post-traitement automatique des résultats

Le script ***post_traitement*** génère automatiquement le post-traitement des résultats et compilant les résultats de chaque VES et en calculant les moyennes et écart type de chaque élément de résultat. Les résultats sont répertoriés dans le dossier \resultat selon l'arborescence de dossier similaire à celle des paramètres. Finalement, le script ***figures.gnu*** génère automatiquement une liste de figure à l'aide du logiciel *Gnuplot*.

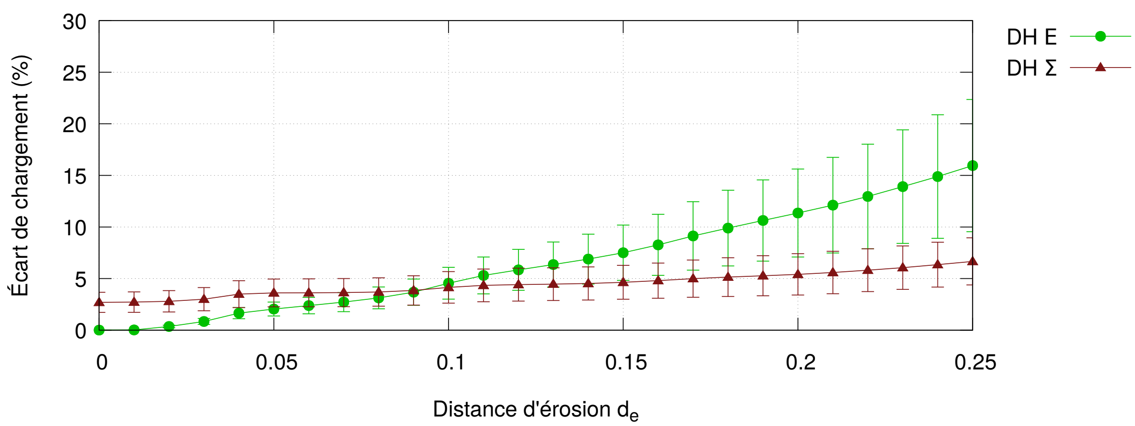
Annexe B

Résultats complémentaires de l'étude du composite verre/époxy

B.1 Écarts de chargement des VES générés par la méthode RSA

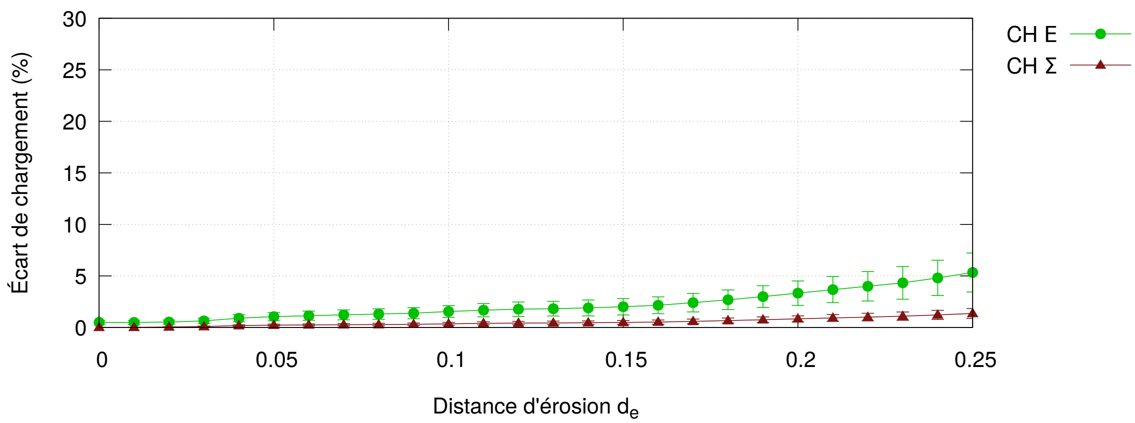


(a) RSA_S1FV05

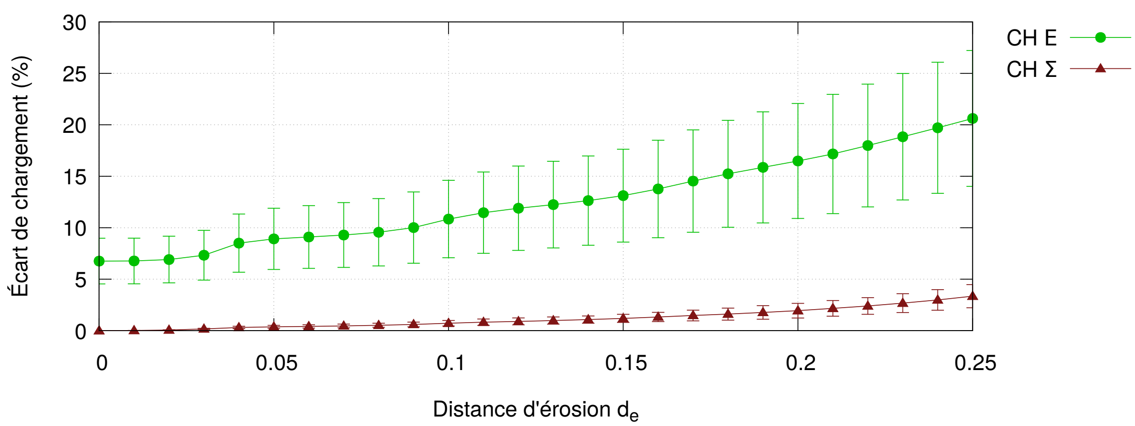


(b) RSA_C1FV05

FIGURE B.1 – Illustration de l'écart des chargements sphériques $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH. a) RSA_S1FV05. b) RSA_C1FV05.

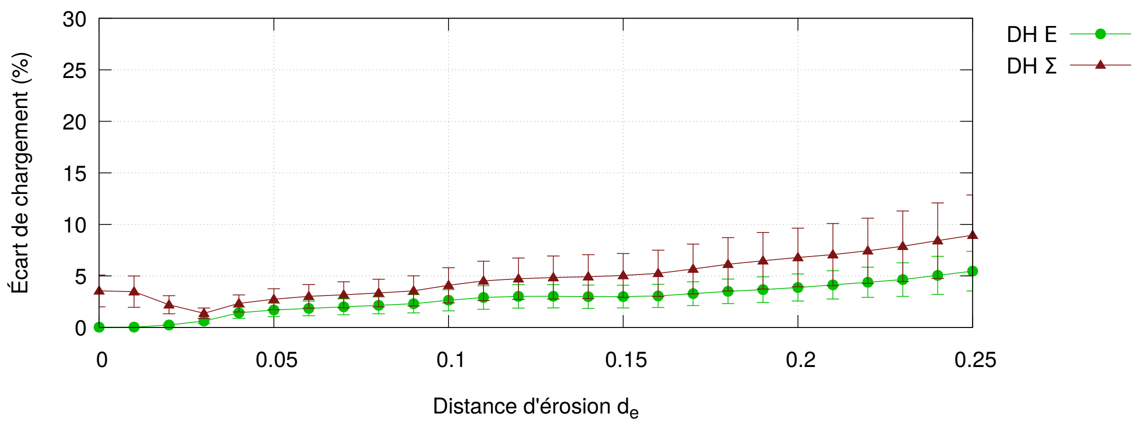


(a) RSA_S1FV05

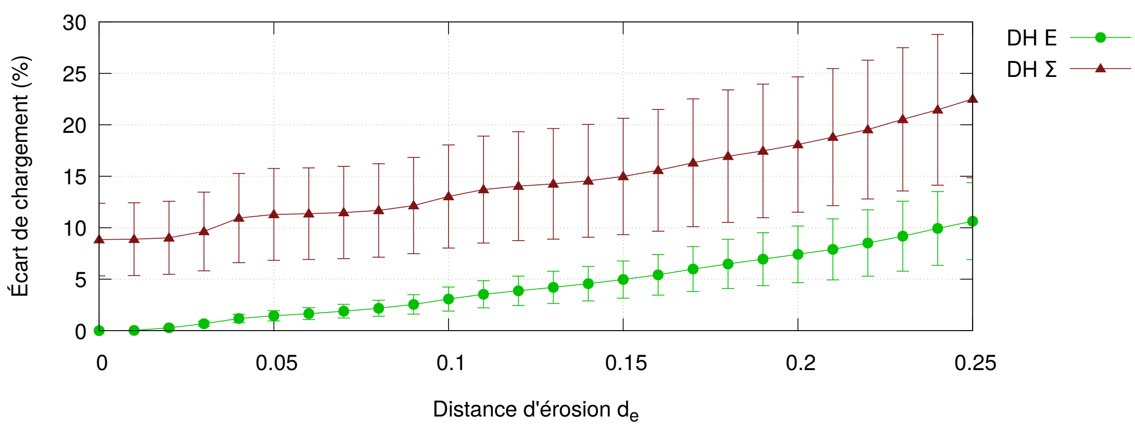


(b) RSA_C1FV05

FIGURE B.2 – Illustration de l'écart des chargements sphériques $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLCH. a) RSA_S1FV05. b) RSA_C1FV05.

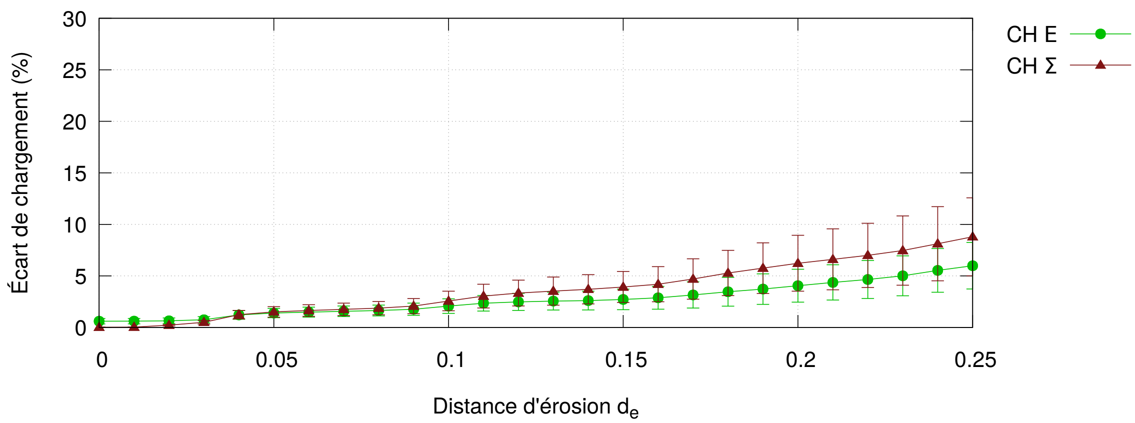


(a) RSA_S1FV05

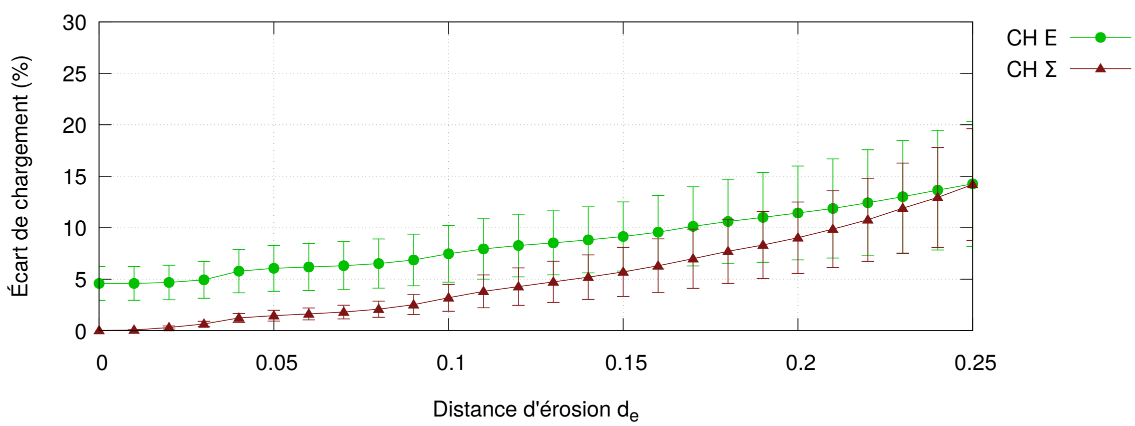


(b) RSA_C1FV05

FIGURE B.3 – Illustration de l'écart des chargements déviatoriques $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH. a) RSA_S1FV05. b) RSA_C1FV05.

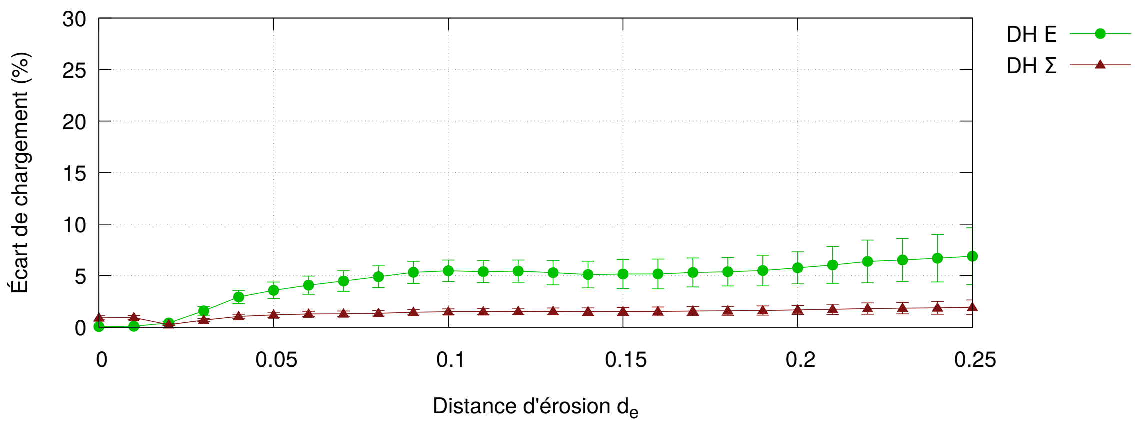


(a) RSA_S1FV05

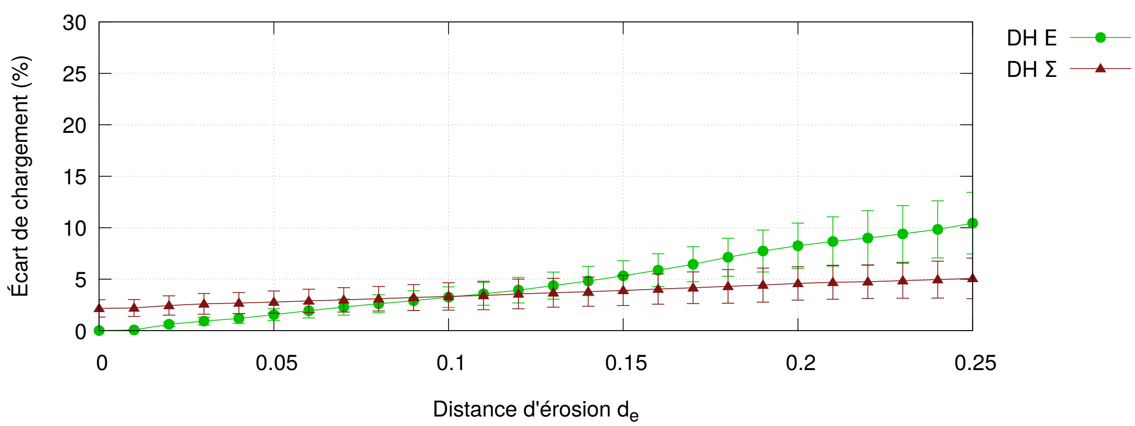


(b) RSA_C1FV05

FIGURE B.4 – Illustration de l'écart des chargements déviatoriques $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLCH. a) RSA_S1FV05. b) RSA_C1FV05.

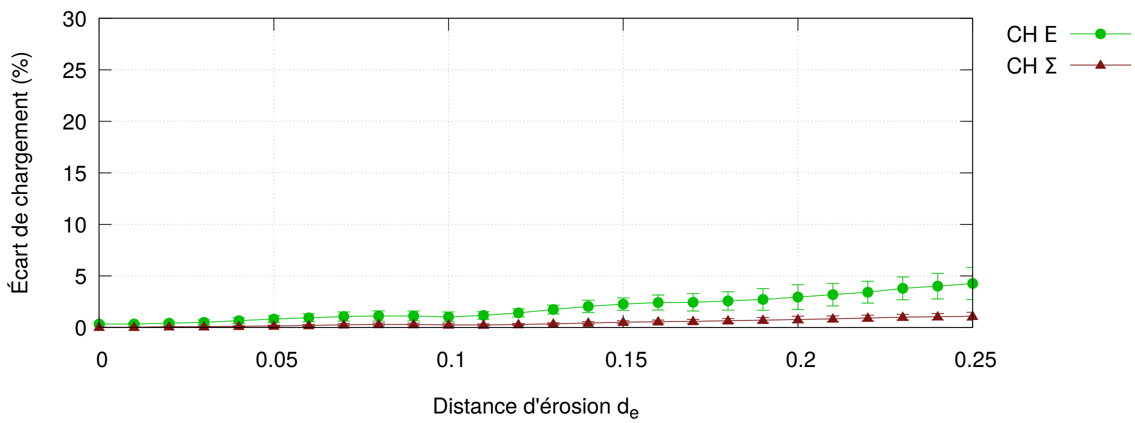


(a) RSA_S2FV10

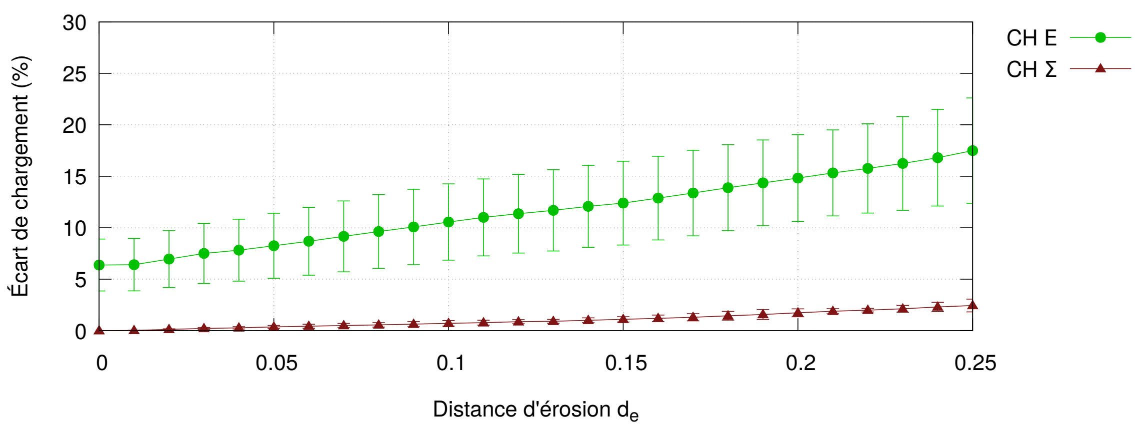


(b) RSA_C2FV10

FIGURE B.5 – Illustration de l'écart des chargements sphériques $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH. a) RSA_S2FV10. b) RSA_C2FV10.

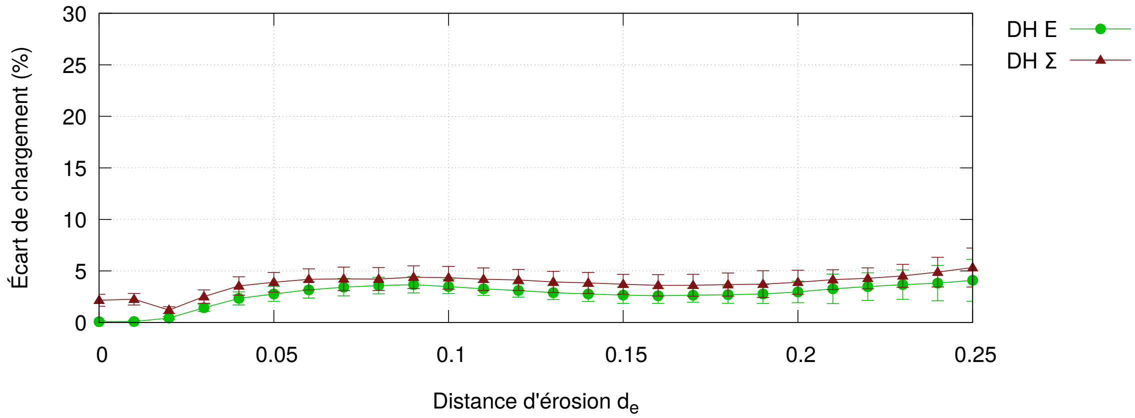


(a) RSA_S2FV10

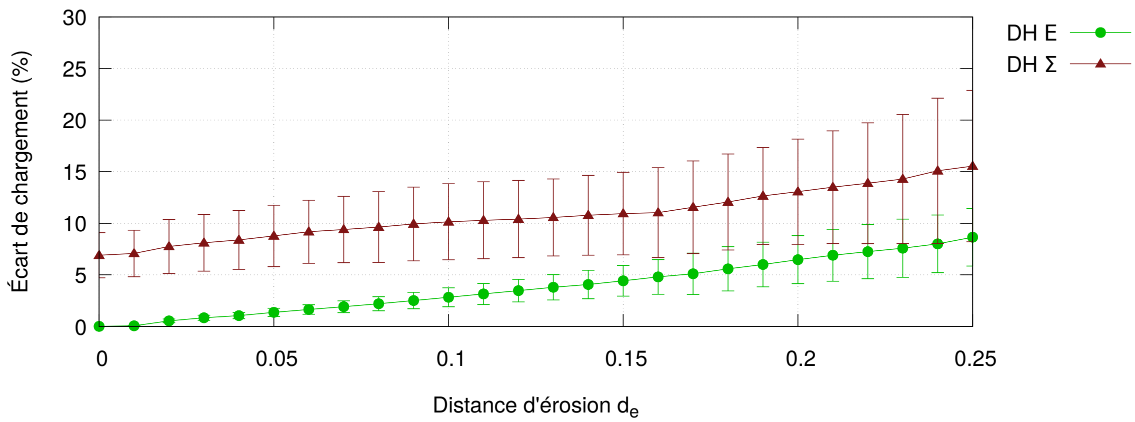


(b) RSA_C2FV10

FIGURE B.6 – Illustration de l'écart des chargements sphériques $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLCH. a) RSA_S2FV10. b) RSA_C2FV10.

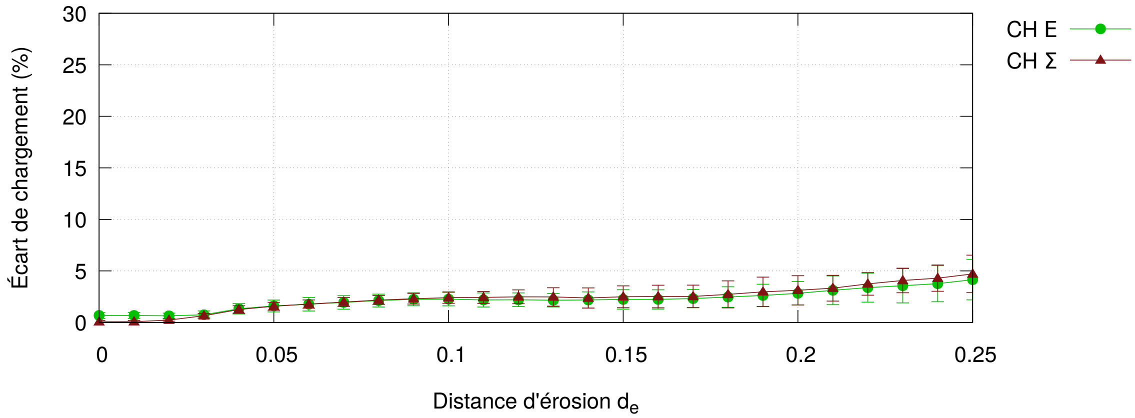


(a) RSA_S2FV10

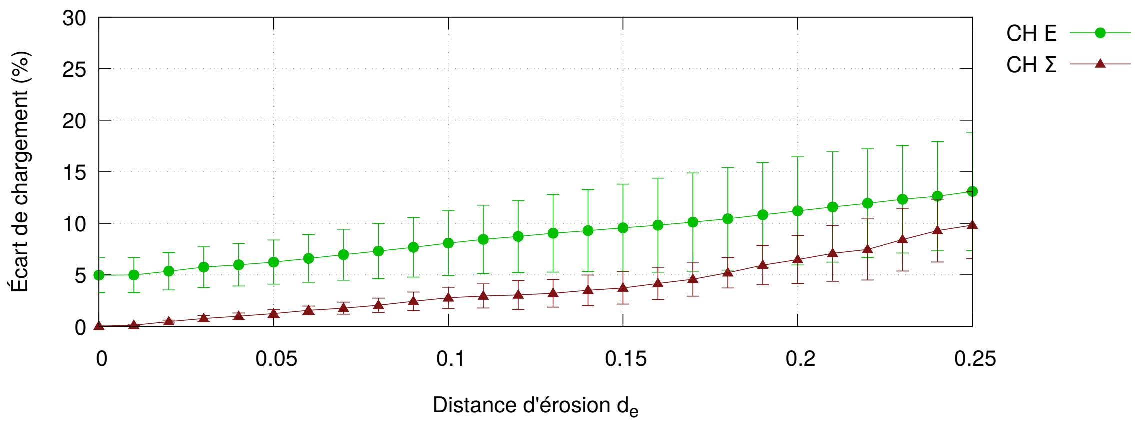


(b) RSA_C2FV10

FIGURE B.7 – Illustration de l'écart des chargements déviatoriques $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH. a) RSA_S2FV10. b) RSA_C2FV10.



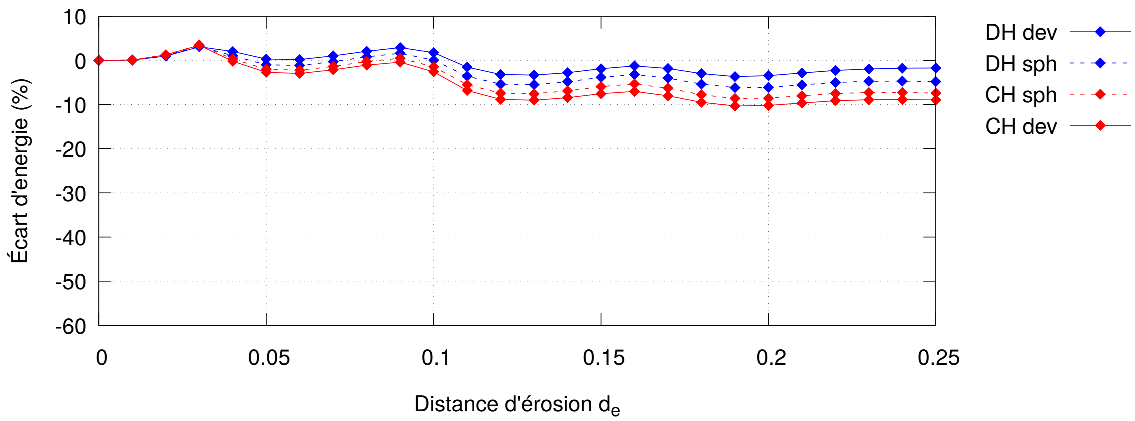
(a) RSA_S2FV10



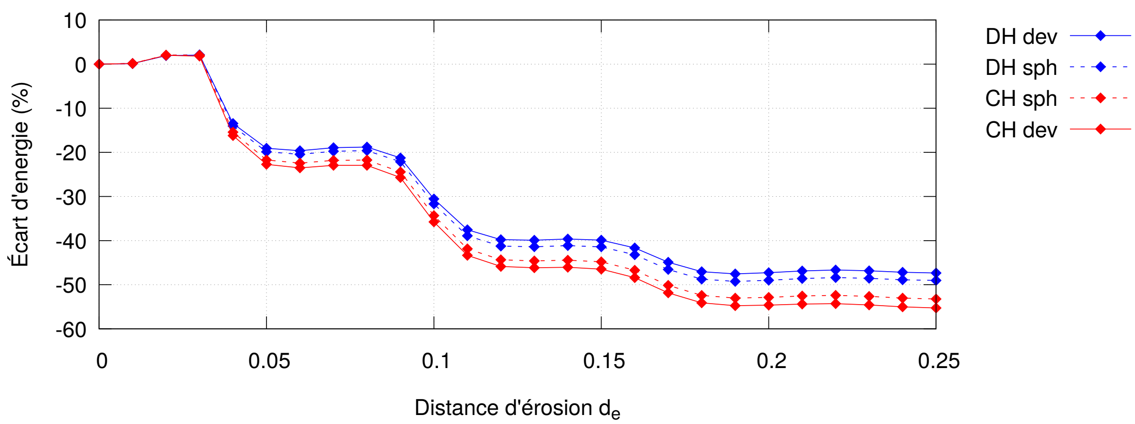
(b) RSA_C2FV10

FIGURE B.8 – Illustration de l'écart des chargements déviatoriques $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLCH. a) RSA_S2FV10. b) RSA_C2FV10.

B.2 Écarts en énergie de déformation des VES générés par la méthode RSA

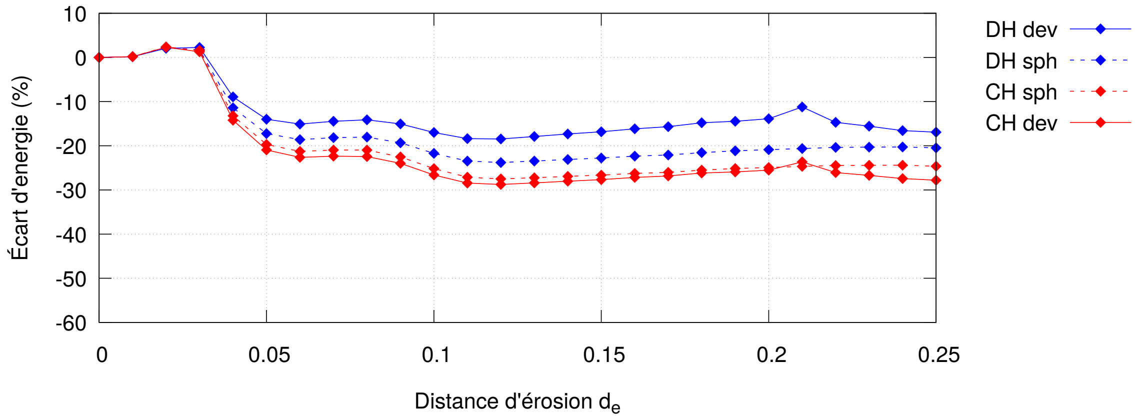


(a) RSA_S1FV05

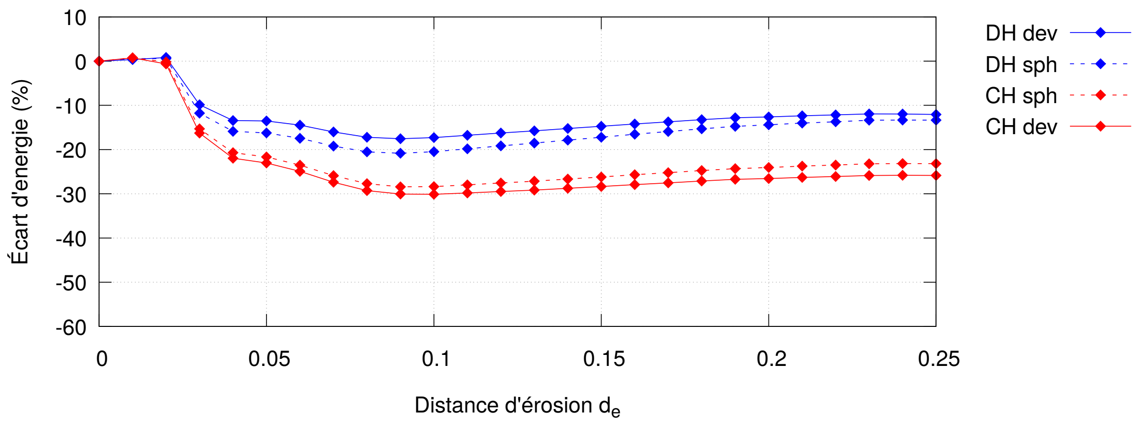


(b) RSA_C1FV05

FIGURE B.9 – Illustration de la variation de l'écart en énergie de déformation Δ^{ed} en fonction de d_e. a) RSA_S1FV10. b) RSA_C1FV05.



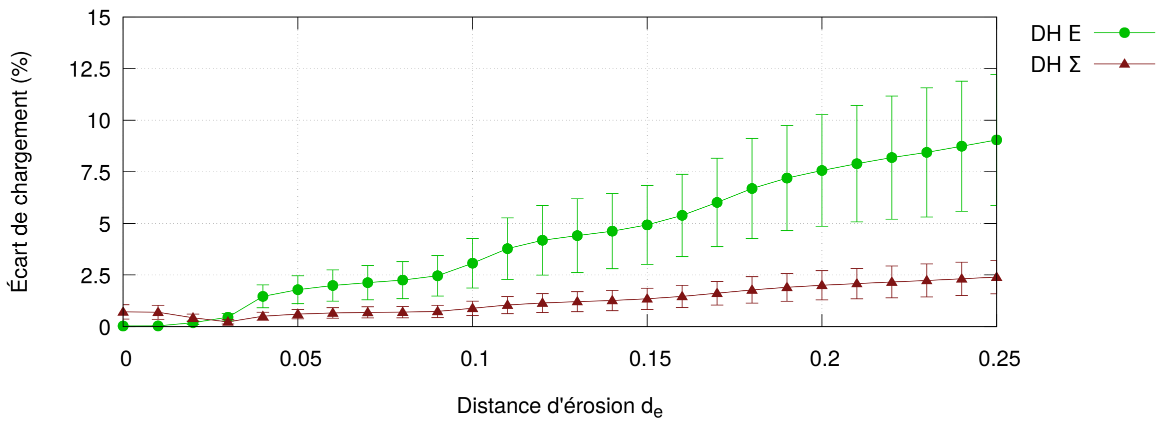
(a) RSA_S2FV10



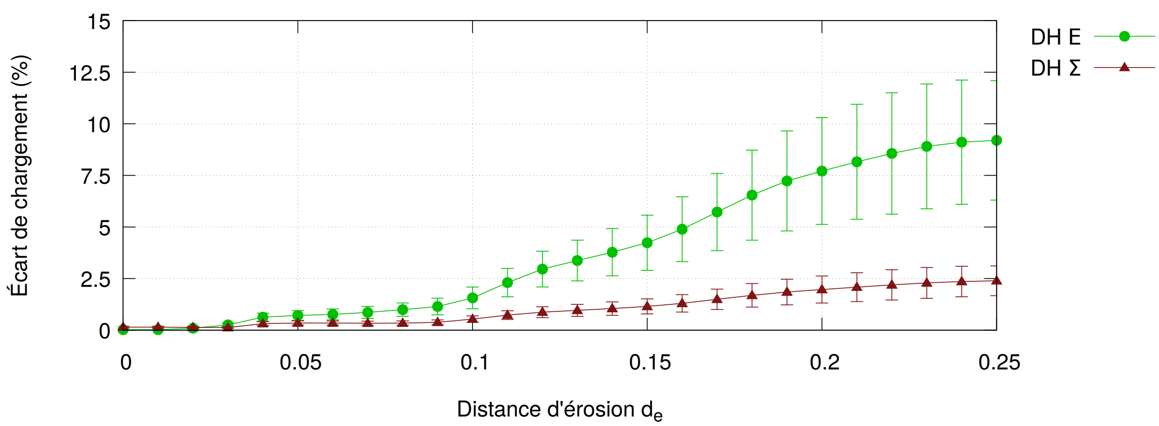
(b) RSA_C2FV10

FIGURE B.10 – Illustration de la variation de l'écart en énergie de déformation Δ^{ed} en fonction de d_e. a) RSA_S1FV10. b) RSA_C1FV10.

B.3 Écarts de chargement des VES générés par la méthode DCR

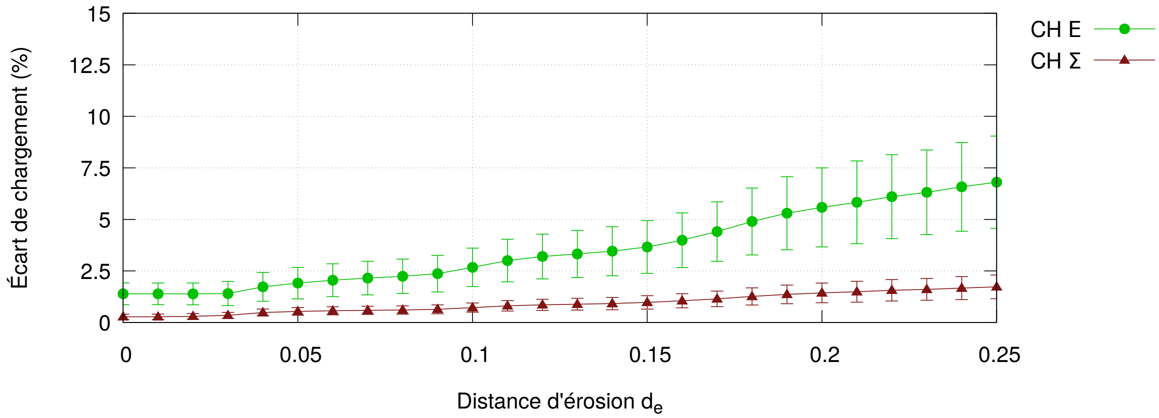


(a) DCR_S1FV10_INT

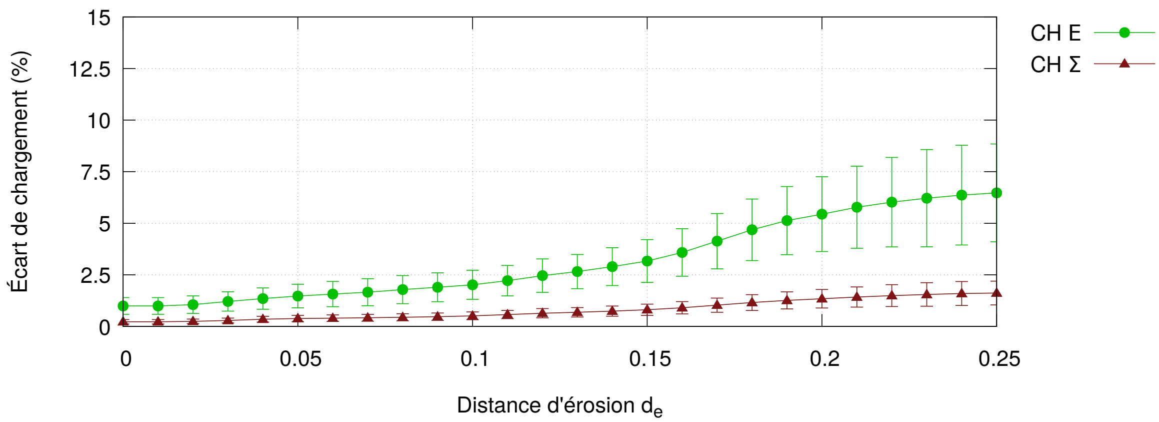


(b) DCR_S1FV10_NOI

FIGURE B.11 – Illustration de l'écart des chargements sphériques $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH. a) DCR_S1FV10_INT. b) DCR_S1FV10_NOI.

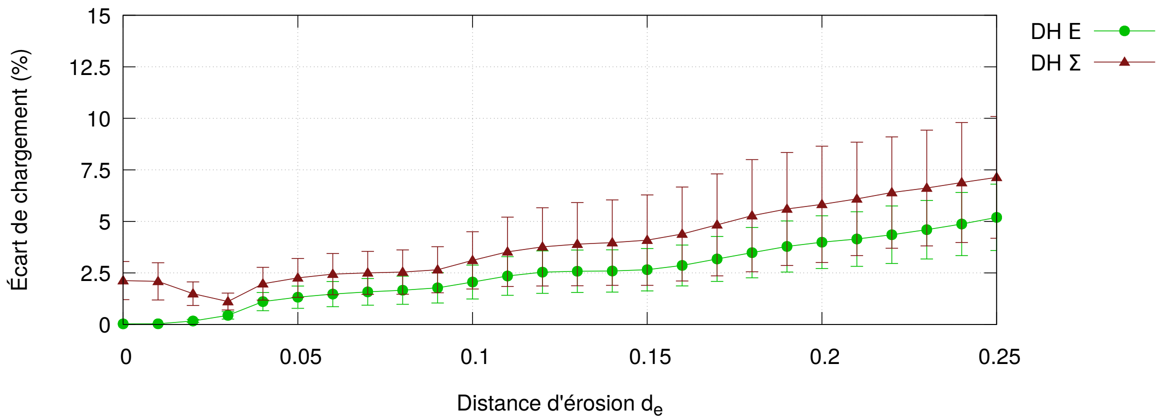


(a) DCR_S1FV10_INT

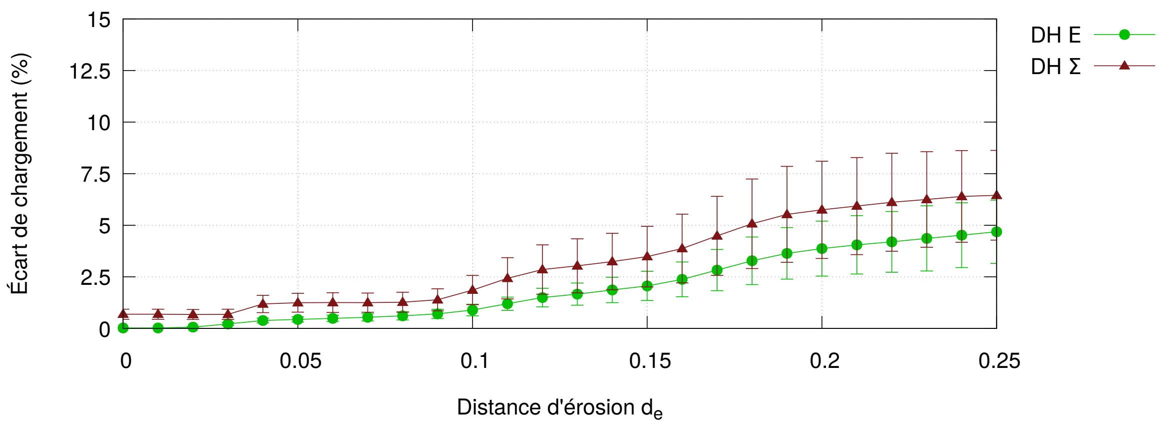


(b) DCR_S1FV10_NOI

FIGURE B.12 – Illustration de l'écart des chargements sphériques $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLCH. a) DCR_S1FV10_INT. b) DCR_S1FV10_NOI.

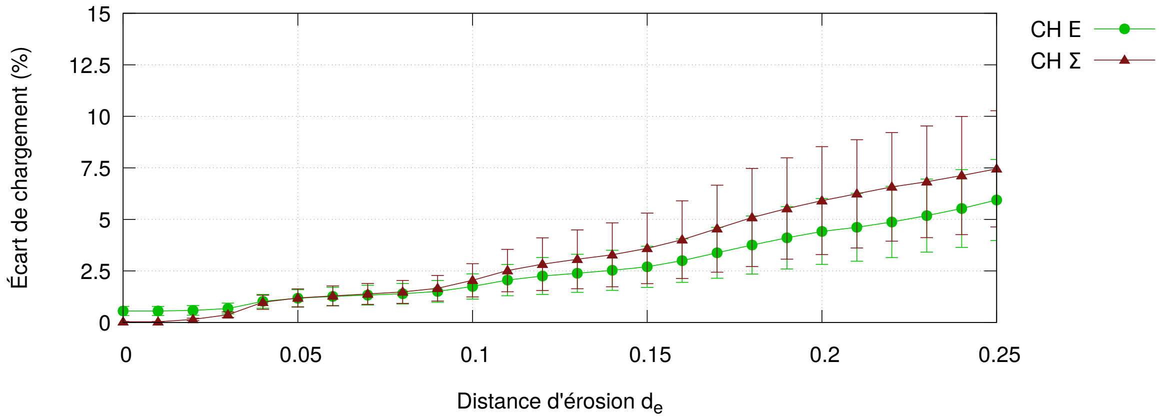


(a) DCR_S1FV10_INT

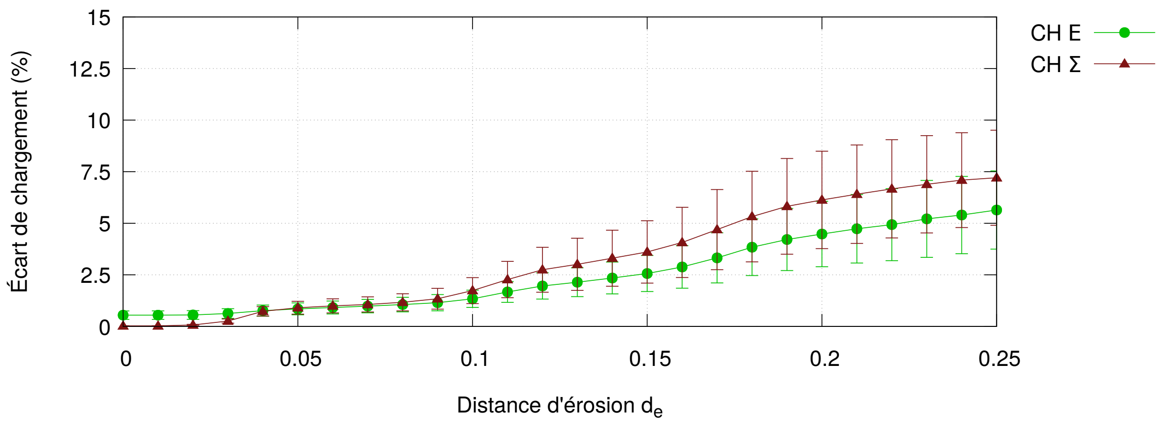


(b) DCR_S1FV10_NOI

FIGURE B.13 – Illustration de l'écart des chargements déviatorique $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^D(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH. a) DCR_S1FV10_INT. b) DCR_S1FV10_NOI.

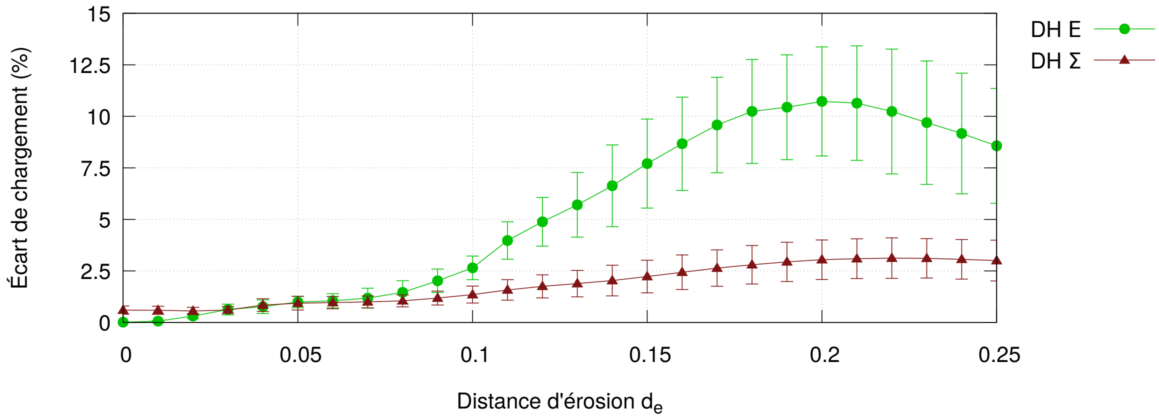


(a) DCR_S1FV10_INT

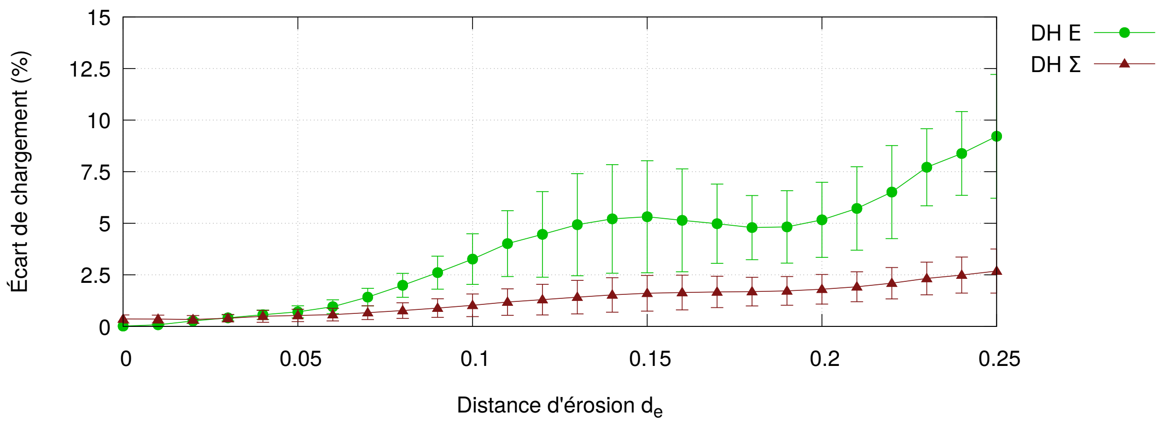


(b) DCR_S1FV10_NOI

FIGURE B.14 – Illustration de l'écart des chargements déviatorique $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^D(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLCH. a) DCR_S1FV10_INT. b) DCR_S1FV10_NOI.

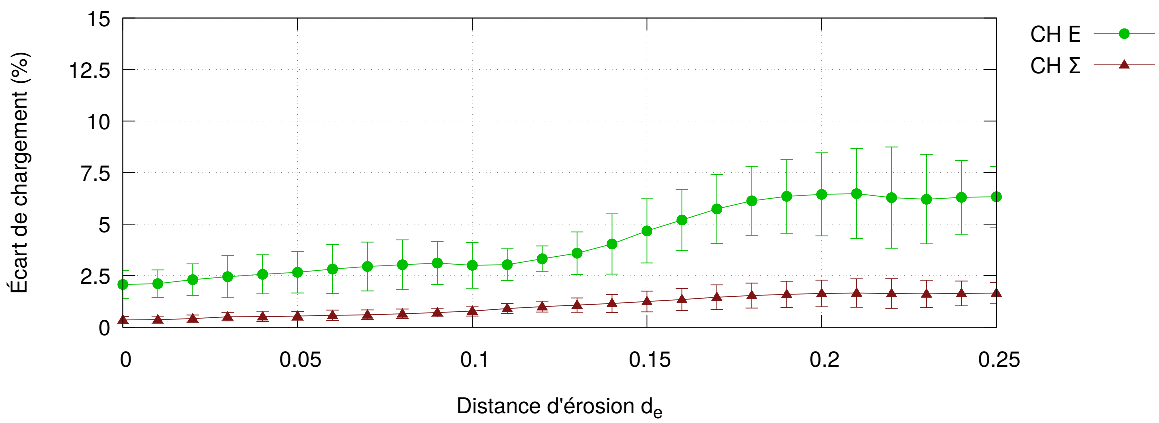


(a) DCR_S1FV30_NOI

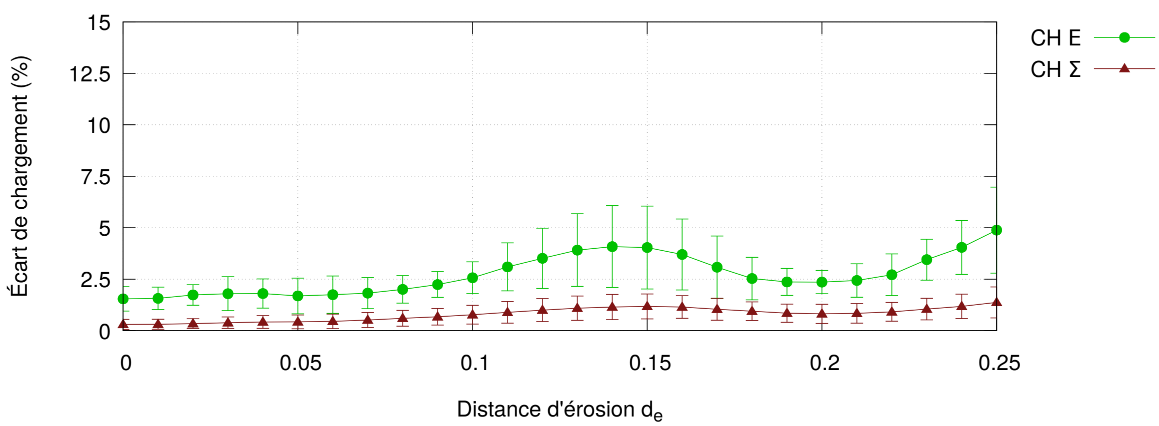


(b) DCR_S2FV30_NOI

FIGURE B.15 – Illustration de l'écart des chargements sphériques $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH. a) DCR_S1FV30_NOI. b) DCR_S2FV30_NOI.

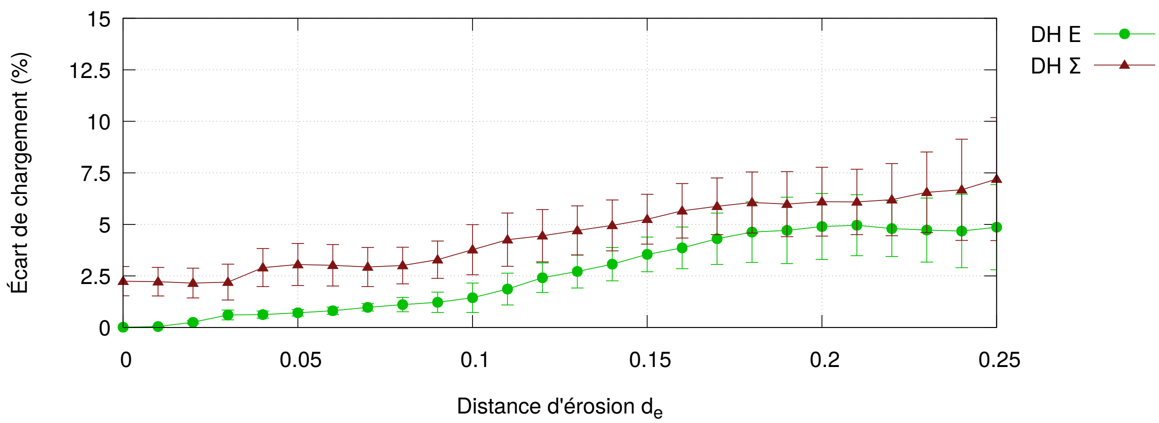


(a) DCR_S1FV30_NOI

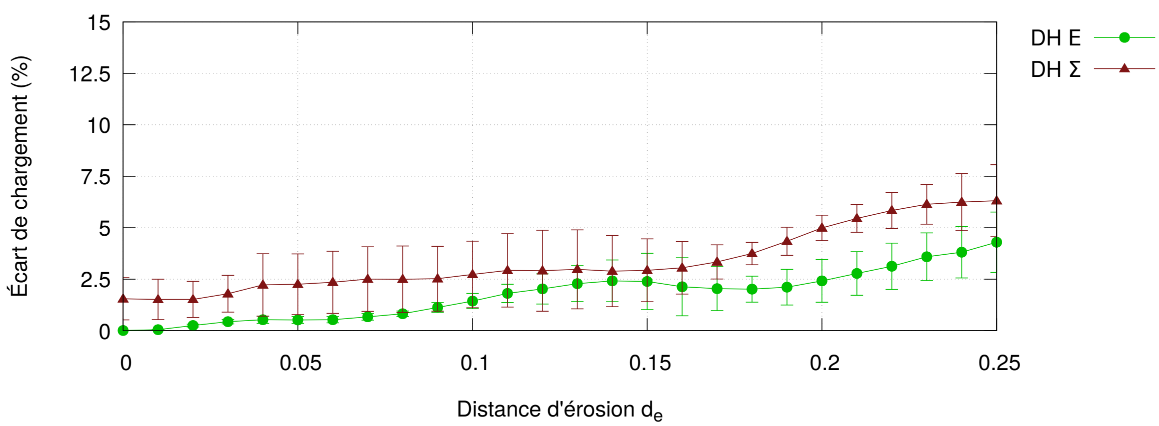


(b) DCR_S1FV30_NOI

FIGURE B.16 – Illustration de l'écart des chargements sphériques $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLCH. a) DCR_S1FV30_NOI. b) DCR_S2FV30_NOI.

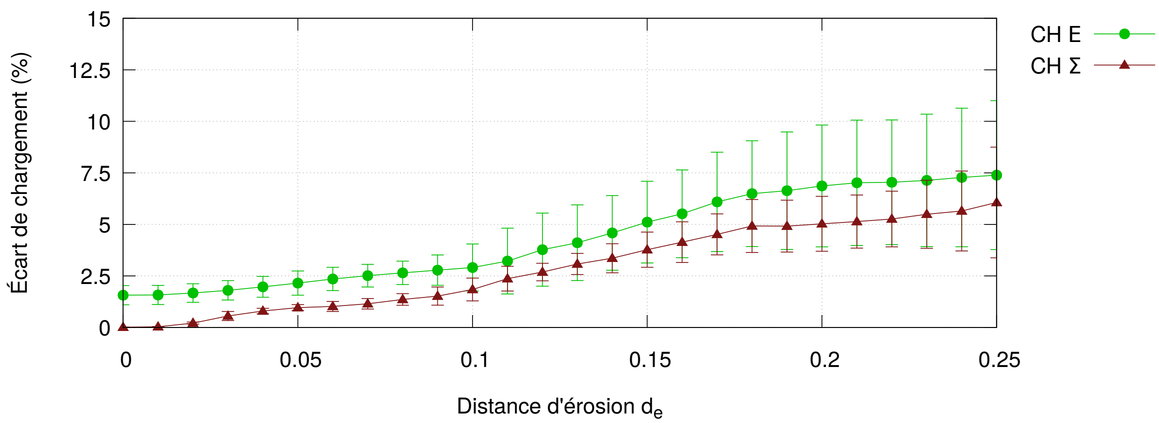


(a) DCR_S1FV30_NOI

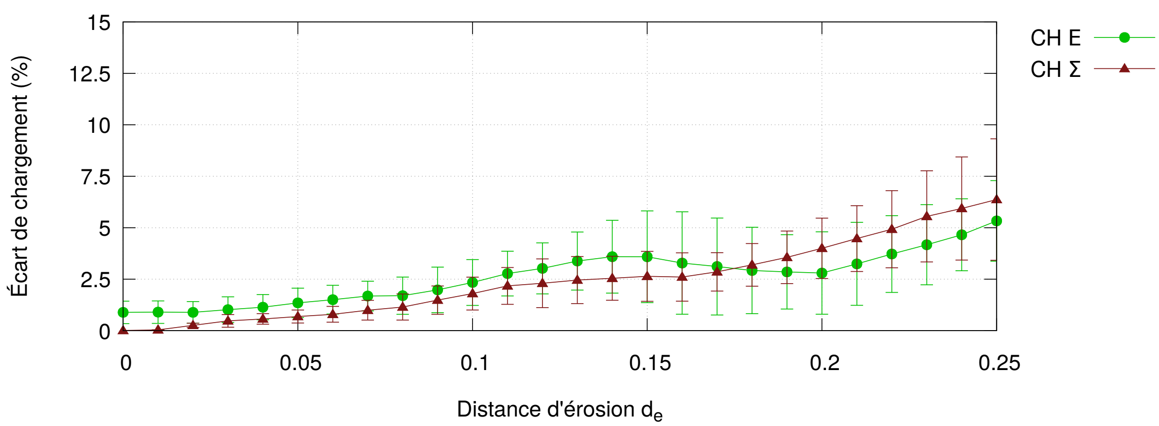


(b) DCR_S2FV30_NOI

FIGURE B.17 – Illustration de l'écart des chargements déviatorique $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^D(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH. a) DCR_S1FV30_NOI. b) DCR_S2FV30_NOI.

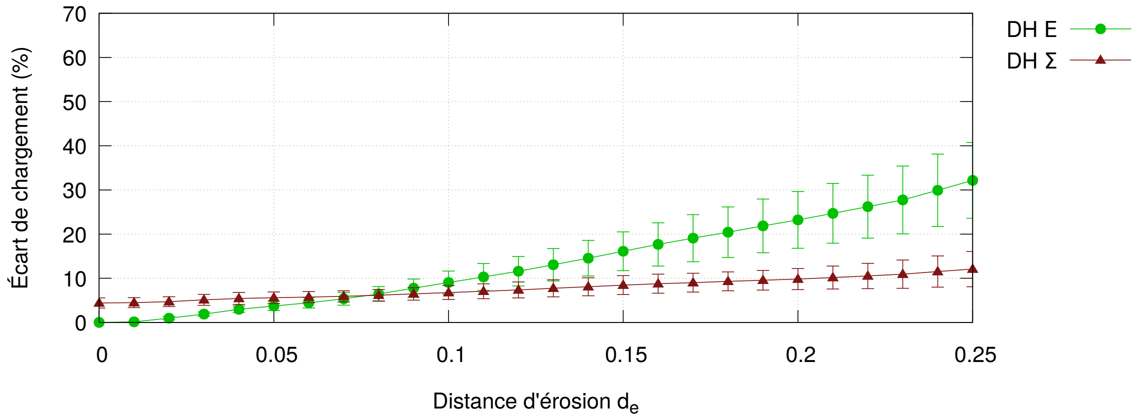


(a) DCR_S1FV30_NOI

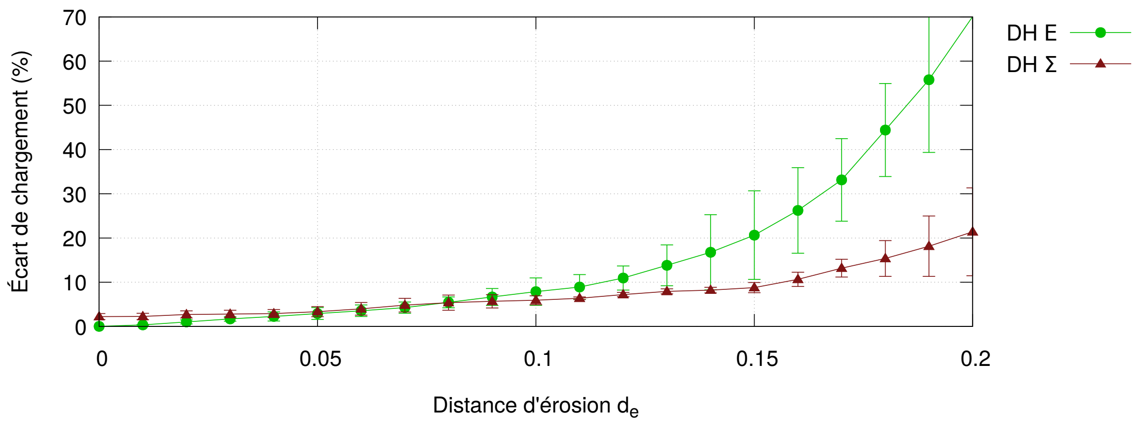


(b) DCR_S2FV30_NOI

Figure B.18 – Illustration de l'écart des chargements déviatorique $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^D(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLCH. a) DCR_S1FV30_NOI. b) DCR_S2FV30_NOI.

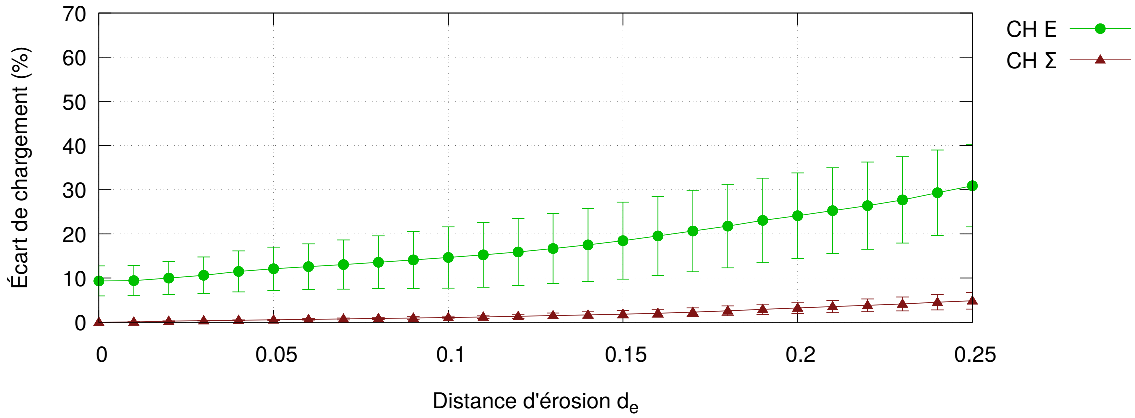


(a) DCR_C1FV30_INT

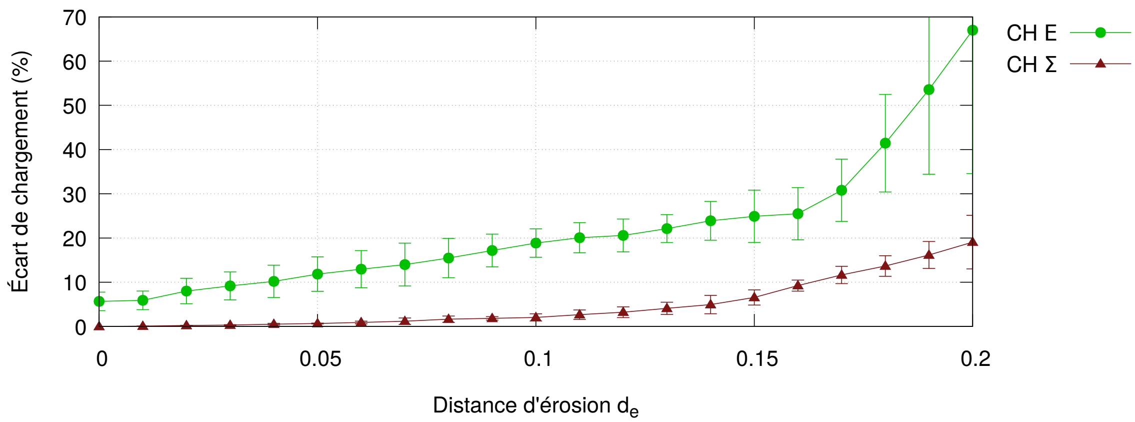


(b) DCR_C2FV30_NOI

FIGURE B.19 – Illustration de l'écart des chargements sphériques $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH. a) DCR_C1FV30_INT. b) DCR_C2FV30_NOI.

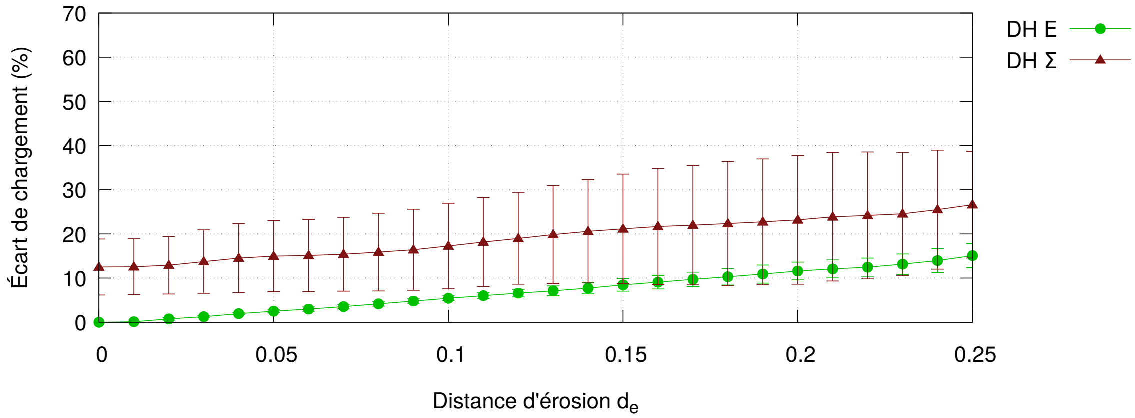


(a) DCR_C1FV30_INT

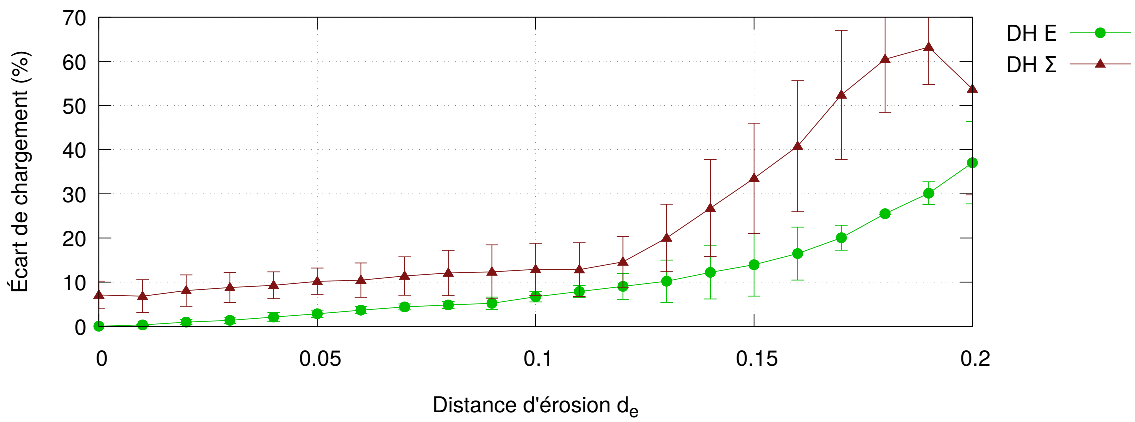


(b) DCR_C2FV30_NOI

FIGURE B.20 – Illustration de l'écart des chargements sphériques $\Delta^S(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^S(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLCH. a) DCR_C1FV30_INT. b) DCR_C2FV30_NOI.

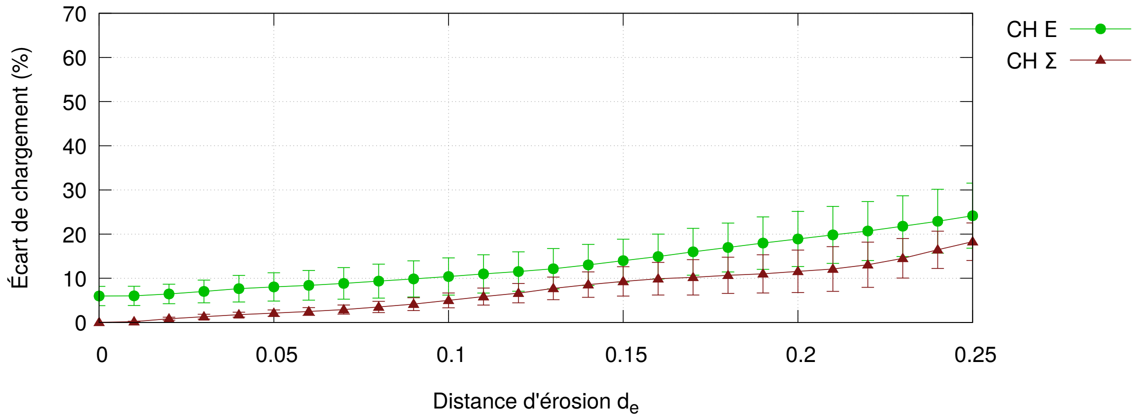


(a) DCR_C1FV30_INT

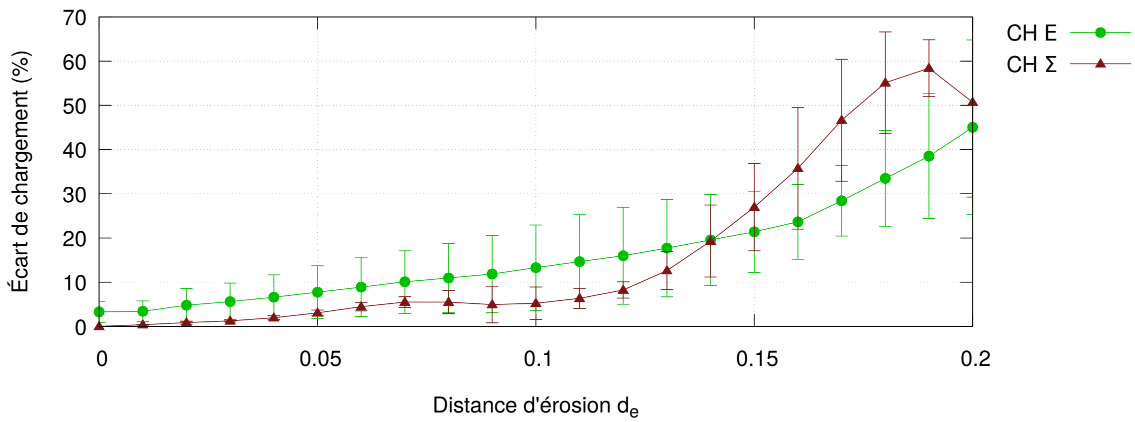


(b) DCR_C2FV30_NOI

FIGURE B.21 – Illustration de l'écart des chargements déviatorique $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^D(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLDH. a) DCR_C1FV30_INT. b) DCR_C2FV30_NOI.



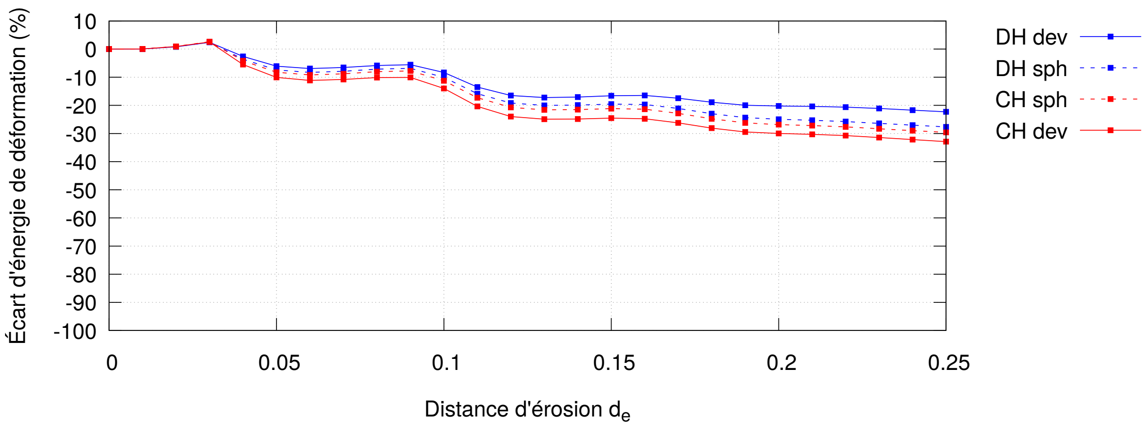
(a) DCR_C1FV30_INT



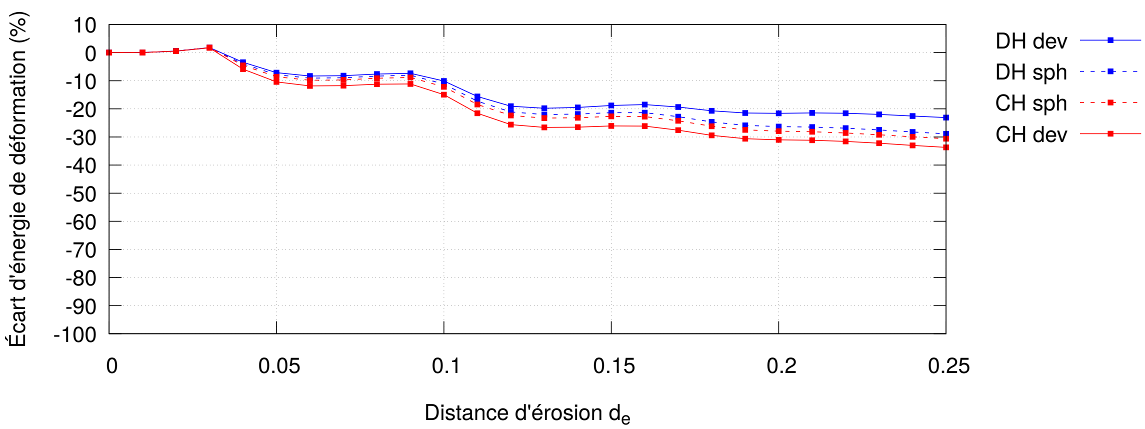
(b) DCR_C2FV30_NOI

FIGURE B.22 – Illustration de l'écart des chargements déviatorique $\Delta^D(\underline{\underline{E}})$ et $\Delta^D(\underline{\underline{\Sigma}})$ en CLCH. a) DCR_C1FV30_INT. b) DCR_C2FV30_NOI.

B.4 Écarts en énergie de déformation des VES générés par la méthode DCR

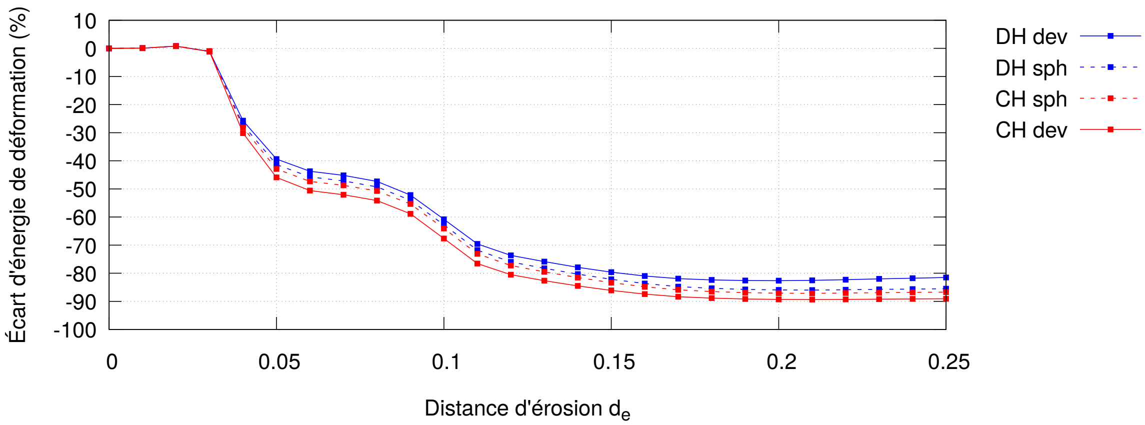


(a) DCR_S1FV10_INT

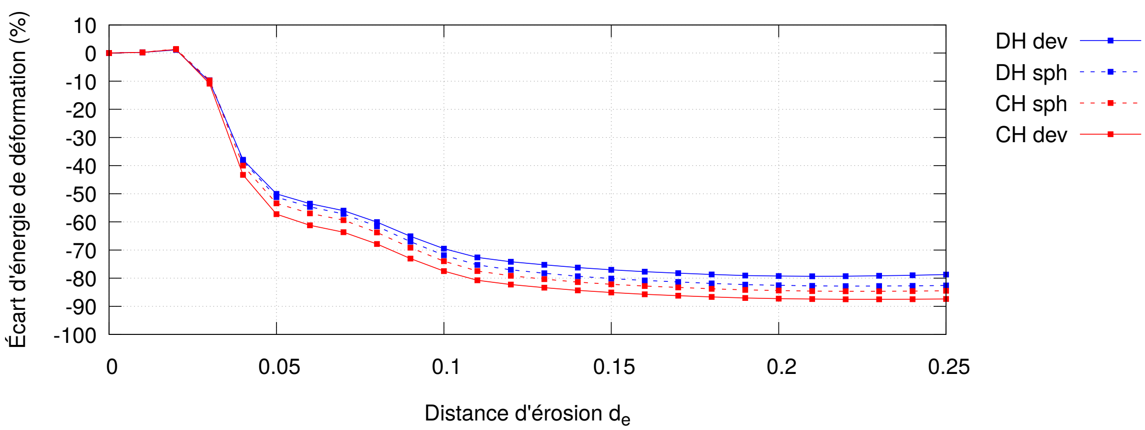


(b) DCR_S1FV10_NOI

FIGURE B.23 – Illustration de la variation de l'écart en énergie de déformation Δ^{ed} en fonction de d_e. a) DCR_S1FV10_INT. b) DCR_S1FV10_NOI.

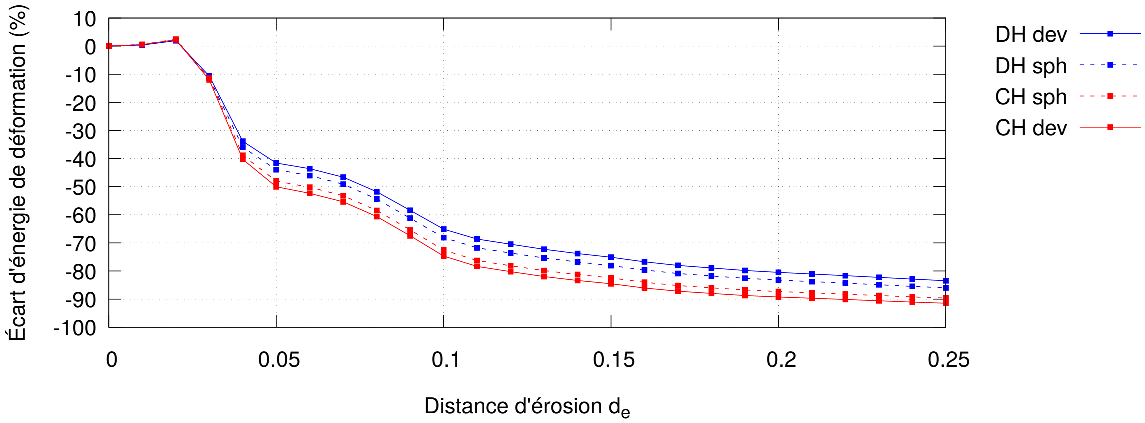


(a) DCR_S1FV30_NOI

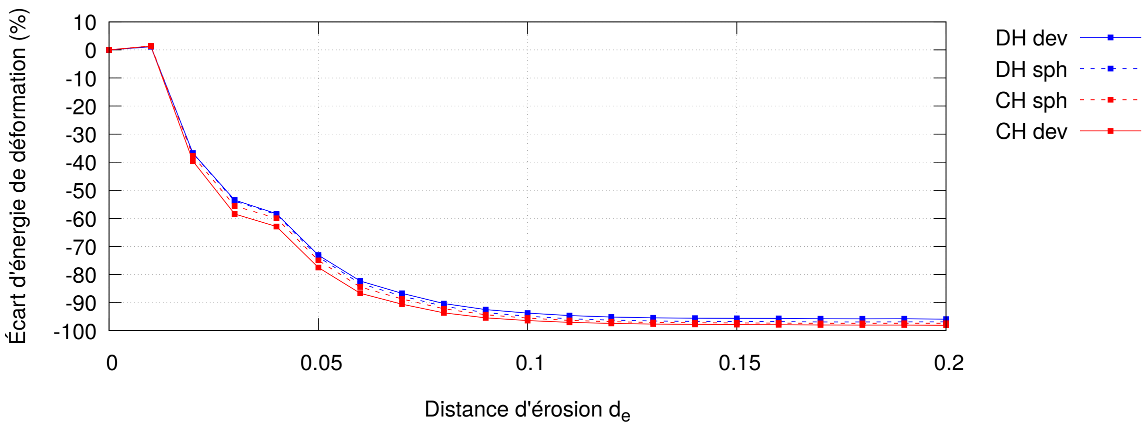


(b) DCR_S2FV30_NOI

FIGURE B.24 – Illustration de la variation de l'écart en énergie de déformation Δ^{ed} en fonction de d_e. a) DCR_S1FV30_NOI. b) DCR_S2FV30_NOI.



(a) DCR_C1FV30_NOI



(b) DCR_C2FV30_NOI

FIGURE B.25 – Illustration de la variation de l'écart en énergie de déformation Δ^{ed} en fonction de d_e. a) DCR_C1FV30_NOI. b) DCR_C2FV30_NOI.